



Antonio Marcial Márquez Cruz

Generado desde: Universidad de Sevilla (Unidad de Bibliometría)

Fecha del documento: 06/11/2023

v 1.4.3

eaacfa40bb863b04ae5f499b3941200b



Antonio Marcial Márquez Cruz

Apellidos: **Márquez Cruz**
Nombre: **Antonio Marcial**
DNI:
Perfil de Dialnet: **3024356**
ResearcherID: **M-2878-2014**
ScopusID: **35404737000**
ORCID: **0000-0001-6699-064X**
Perfil de Google Académico: **uZCBez0AAAAJ**
Fecha de nacimiento:
Sexo:
Nacionalidad: **España**
Correo electrónico:

Situación profesional actual

Entidad empleadora: Universidad de Sevilla **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Química Física
Categoría profesional: Catedrático de Universidad
Ciudad entidad empleadora: Sevilla, Andalucía, España
Fecha de inicio: 21/12/2017



Formación académica recibida

Titulación universitaria

Doctorados

Entidad de titulación: Universidad de Sevilla

Fecha de titulación: 01/01/1991

Título de la tesis: Estudio teórico y experimental de la estructura electrónica de algunos carbonilos de metales de transición y análisis del enlace que establecen con metales representativos del grupo 14

Director/a de tesis: Javier Fernández Sanz

Actividad docente

Dirección de tesis doctorales y/o proyectos fin de carrera

- 1 Título del trabajo:** PROPIEDADES OPTOELECTRÓNICAS DE ÓXIDOS Y SULFUROS METÁLICOS
Tipo de proyecto: Tesis Doctoral
Codirector/a tesis: Fernandez Sanz, Javier
Entidad de realización: Universidad de Sevilla
Alumno/a: Amaya Suarez, Javier
Calificación obtenida: Sobresaliente "Cum Laude"
Fecha de defensa: 22/05/2019
- 2 Título del trabajo:** CERIA FOR ALL SEASONS
Tipo de proyecto: Tesis Doctoral
Codirector/a tesis: Fernandez Sanz, Javier
Entidad de realización: Universidad de Sevilla
Alumno/a: Plata Ramos, Jose Javier
Calificación obtenida: Sobresaliente "Cum Laude"
Fecha de defensa: 23/07/2013
Doctorado Europeo: Si
- 3 Título del trabajo:** Estructura electrónica y molecular de carbenos y estannilenos de zinc: fototransposición carbono-carbino de zinc.
Tipo de proyecto: Tesis Doctoral
Codirector/a tesis: Javier Fernández Sanz
Entidad de realización: Universidad de Sevilla
Alumno/a: Miguel Angel San Miguel Barrera
Fecha de defensa: 1994



Experiencia científica y tecnológica

Actividad científica o tecnológica

Proyectos de I+D+i financiados en convocatorias competitivas de Administraciones o entidades públicas y privadas

- 1 Nombre del proyecto:** Búsqueda y optimización de la eficiencia termoeléctrica de escuteruditas usando bases de datos, entornos de alto rendimiento, simulaciones atomísticas y aprendizaje automático

Ámbito geográfico: Nacional

Grado de contribución: Responsable

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Márquez Cruz, Antonio Marcial; Plata Ramos, José Javier

Nº de investigadores/as: 8

Entidad/es financiadora/s: Ministerio de Ciencia e Innovación

Tipo de entidad: Organismo, Otros

Nombre del programa: Proyectos de Transición Ecológica y Transición Digital

Cód. según financiadora: TED2021-130874B-I00

Fecha de inicio-fin: 01/12/2022 - 30/11/2024

Duración: 2 años

Cuantía total: 184.000 €
- 2 Nombre del proyecto:** Diseño y Modelización Computacional de Materiales Termoeléctricos Basados en Calcogenuros y Oxicalcogenuros Metálicos

Ámbito geográfico: Nacional

Grado de contribución: Responsable

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Márquez Cruz, Antonio Marcial; Plata Ramos, José Javier

Nº de investigadores/as: 8

Entidad/es financiadora/s: Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades

Nombre del programa: Plan Estatal 2017-2020 Generación Conocimiento - Proyectos I+D+i

Cód. según financiadora: PID2019-106871GB-I00

Fecha de inicio-fin: 01/06/2020 - 31/05/2023

Duración: 3 años

Cuantía total: 54.450 €
- 3 Nombre del proyecto:** Diseño Computacional de Catalizadores Avanzados: Nanopartículas Metálicas Soportadas Sobre Óxidos Metálicos Mixtos

Ámbito geográfico: Nacional

Grado de contribución: Investigador/a

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Fernández Sanz, Javier

Nº de investigadores/as: 3

Entidad/es financiadora/s: Ministerio de Economía y Competitividad

Nombre del programa: Plan Estatal 2013-2016 Excelencia - Proyectos I+D

Cód. según financiadora: CTQ2015-64669-P

Fecha de inicio-fin: 01/01/2016 - 31/12/2019

Duración: 4 años



Cuantía total: 61.589 €

- 4 Nombre del proyecto:** Celdas Solares con Sensibilizador: Propiedades Electrónicas de Nanoestructuras de Sulfuros Metálicos Utilizados Como Captore de Energía (Qdsc).

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Investigador/a

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Fernández Sanz, Javier

Nº de investigadores/as: 7

Entidad/es financiadora/s:

Consejería de Economía, Innovación y Ciencia

Nombre del programa: Proyectos de Excelencia de la Junta de Andalucía

Cód. según financiadora: P12-FQM-1595

Fecha de inicio-fin: 30/01/2014 - 31/07/2019

Duración: 5 años - 6 meses - 2 días

Cuantía total: 150.644 €

- 5 Nombre del proyecto:** Simulación de Catalizadores: Nanopartículas de Metales y Óxidos Metálicos Depositadas en un Soporte: Estructura, Propiedades Electrónicas y Actividad Catalítica.

Ámbito geográfico: Nacional

Grado de contribución: Investigador/a

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Fernández Sanz, Javier

Nº de investigadores/as: 8

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Economía y Competitividad

Nombre del programa: Plan Nacional del 2012

Cód. según financiadora: MAT2012-31526

Fecha de inicio-fin: 01/01/2013 - 31/12/2015

Duración: 3 años

Cuantía total: 64.350 €

- 6 Nombre del proyecto:** Celdas Solares con Sensibilizador: Simulación de la Estructura de la Interfase Electrolito/Semiconductor

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Investigador/a

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Fernández Sanz, Javier

Nº de investigadores/as: 10

Entidad/es financiadora/s:

Junta de Andalucía - Consejería de Innovación, Ciencia y Empresas

Nombre del programa: Proyectos de Excelencia de la Junta de Andalucía

Cód. según financiadora: P08-FQM-03661

Fecha de inicio-fin: 13/01/2009 - 31/12/2013

Duración: 4 años - 11 meses - 19 días

Cuantía total: 151.323,68 €

- 7 Nombre del proyecto:** Simulación de catalizadores, reactividad de superficies de TiO₂ y SnO₂ dopadas con C, N y Sb, interfases metal/soporte, y propiedades electrónicas de sistemas de tipo colorante/soporte

Ámbito geográfico: Nacional

Grado de contribución: Investigador/a

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Fernández Sanz, Javier

Nº de investigadores/as: 10

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Educación y Ciencia



Nombre del programa: Plan Nacional del 2008
Cód. según financiadora: MAT2008-04918
Fecha de inicio-fin: 01/01/2009 - 31/12/2011 **Duración:** 3 años
Cuantía total: 164.560 €

8 **Nombre del proyecto:** Celdas solares con sensibilizador: simulación de la actividad del colorante en el proceso de captación de energía
Ámbito geográfico: Autonómica
Grado de contribución: Investigador/a
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Fernández Sanz, Javier
Nº de investigadores/as: 6
Entidad/es financiadora/s:
Junta de Andalucía (Plan Andaluz de Investigación)

Nombre del programa: Proyectos de Excelencia de la Junta de Andalucía
Cód. según financiadora: EXC/2005/FQM-1126
Fecha de inicio-fin: 01/03/2006 - 28/02/2009 **Duración:** 3 años
Cuantía total: 115.800 €

9 **Nombre del proyecto:** Simulación de catalizadores: metales soportados en óxidos de aluminio, titanio y cerio
Ámbito geográfico: Nacional
Grado de contribución: Investigador/a
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Fernández Sanz, Javier
Nº de investigadores/as: 7
Entidad/es financiadora/s:
Ministerio de Educación y Ciencia

Nombre del programa: Plan Nacional del 2005
Cód. según financiadora: MAT2005-01872
Fecha de inicio-fin: 31/12/2005 - 31/12/2008 **Duración:** 3 años - 1 día
Cuantía total: 159.460 €

10 **Nombre del proyecto:** Simulación de catalizadores: estructura y reactividad de metales soportados sobre óxidos y nitruros metálicos
Ámbito geográfico: Nacional
Grado de contribución: Investigador/a
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Fernández Sanz, Javier
Nº de investigadores/as: 6
Entidad/es financiadora/s:
Ministerio de Ciencia y Tecnología

Nombre del programa: Plan Nacional del 2002
Cód. según financiadora: MAT2002-00576
Fecha de inicio-fin: 11/01/2002 - 31/03/2006 **Duración:** 4 años - 2 meses - 21 días
Cuantía total: 81.650 €



Contratos, convenios o proyectos de I+D+i no competitivos con Administraciones o entidades públicas o privadas

1 **Nombre del proyecto:** Estudio computacional de la interacción entre un material silíceo y dos fluidos inmiscibles.

Grado de contribución: Investigador/a

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Fernández Sanz, Javier

Nº de investigadores/as: 3

Entidad/es financiadora/s:

REPSOL, S.A.

Nombre del programa: Contrato 68/83

Cód. según financiadora: 2264/0638

Fecha de inicio: 01/07/2014

Duración: 1 año - 5 meses

Cuantía total: 134.552 €

2 **Nombre del proyecto:** Aplicación de Química computacional a Procesos catalíticos de Epoxidación.

Grado de contribución: Investigador/a

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Fernández Sanz, Javier

Nº de investigadores/as: 5

Entidad/es financiadora/s:

Repsol Petróleo, S.A.

Nombre del programa: Contrato 68/83

Cód. según financiadora: 1735/0638

Fecha de inicio: 20/12/2012

Duración: 9 meses - 11 días

Cuantía total: 46.585 €

Actividades científicas y tecnológicas

Producción científica

Publicaciones, documentos científicos y técnicos

1 Plata, JJ; Blancas, EJ; Marquez, AM; Posligua, V; Sanz, JF; Grau-Crespo, R. Harnessing the unusually strong improvement of thermoelectric performance of AgInTe₂ with nanostructuring. JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY A. 11 - 31, pp. 16734 - 16742. ROYAL SOC CHEMISTRY, 2023. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1039/d3ta02055j>>. ISSN 2050-7488, ISSN 2050-7496

DOI: 10.1039/d3ta02055j

Código WOS: WOS:001034075000001

Código Scopus: 85167352345

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 11.900

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 24

Num. revistas en cat.: 161



Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 11.900
Posición de publicación: 11

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 11.900
Posición de publicación: 32

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 3.156
Posición de publicación: 23

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 3.156
Posición de publicación: 31

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 3.156
Posición de publicación: 13

Fuente de citas: SCOPUS
Fuente de citas: WOS

Categoría: Science Edition - ENERGY & FUELS
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 115

Categoría: Science Edition - MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 342

Categoría: Chemistry (miscellaneous)
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 467

Categoría: Materials Science (miscellaneous)
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 594

Categoría: Renewable Energy, Sustainability and the Environment
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 222

Citas: 0
Citas: 0

- 2** Blancas, Ernesto J.; Plata, Jose J.; Santana, Julia; Lemus-Prieto, Felipe; Márquez, Antonio M.; Fernández Sanz, Javier. Unraveling the role of chemical composition in the lattice thermal conductivity of oxychalcogenides as thermoelectric materials. JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY A. 10 - 37, pp. 19941 - 19952. ROYAL SOC CHEMISTRY, 2022. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1039/d2ta02180c>>. ISSN 2050-7488, ISSN 2050-7496

DOI: 10.1039/d2ta02180c

Código WOS: WOS:000818079900001

Código Scopus: 85133691417

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 5

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 11.900
Posición de publicación: 24

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 11.900
Posición de publicación: 11

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 11.900
Posición de publicación: 32

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 3.156
Posición de publicación: 23

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 161

Categoría: Science Edition - ENERGY & FUELS
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 115

Categoría: Science Edition - MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 342

Categoría: Chemistry (miscellaneous)
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 467

Categoría: Materials Science (miscellaneous)



Índice de impacto: 3.156
Posición de publicación: 31

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 3.156
Posición de publicación: 13

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 594

Categoría: Renewable Energy, Sustainability and the Environment

Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 222

Citas: 6

Citas: 4

- 3** Amaya Suárez, Javier; Plata, José J.; Márquez, Antonio M.; Fernández Sanz, Javier. Catalytic activity of PtCu intermetallic compound for CO oxidation: a theoretical insight. CATALYSIS TODAY. 383, pp. 339 - 344. ELSEVIER SCIENCE BV, 2022. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1016/j.cattod.2020.12.007>>. ISSN 0920-5861, ISSN 1873-4308

DOI: 10.1016/j.cattod.2020.12.007

Código WOS: WOS:000715022800008

Código Scopus: 85098670165

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 5.300

Posición de publicación: 14

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 5.300

Posición de publicación: 57

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 5.300

Posición de publicación: 28

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 1.053

Posición de publicación: 19

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 1.053

Posición de publicación: 70

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, APPLIED

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 72

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 161

Categoría: Science Edition - ENGINEERING, CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 140

Categoría: Catalysis

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 60

Categoría: Chemistry (miscellaneous)

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 467

Citas: 1

Citas: 1

- 4** Amaya Suárez, Javier; García-Prieto, Cristina; Fernández-Martínez, M. Dolores; Remesal, Elena R.; Márquez, Antonio M.; Fernández Sanz, Javier. Optoelectronic properties of Ag₂S/graphene and FeS₂/graphene nanostructures and interfaces: a density functional study including dispersion forces. JOURNAL OF MATERIALS RESEARCH. 37 - 5, pp. 1047 - 1058. MATERIALS RESEARCH SOCIETY, 2022. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1557/s43578-022-00509-1>>. ISSN 0884-2914, ISSN 2044-5326

DOI: 10.1557/s43578-022-00509-1

Handle: 11441/130996

Código WOS: WOS:000760028800001



Código Scopus: 85125078433
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 5
Nº total de autores: 6
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.700
Posición de publicación: 207
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 0.550
Posición de publicación: 158
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 0.550
Posición de publicación: 227
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 0.550
Posición de publicación: 207
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 0.550
Posición de publicación: 140
Fuente de citas: SCOPUS
Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 342
Categoría: Condensed Matter Physics
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 428
Categoría: Materials Science (miscellaneous)
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 594
Categoría: Mechanical Engineering
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 615
Categoría: Mechanics of Materials
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 392
Citas: 1
Citas: 1

5 Plata, José J.; Posligua, Víctor; Márquez, Antonio M.; Fernández Sanz, Javier; Grau-Crespo, Ricardo. Charting the lattice thermal conductivities of I-III-VI₂Chalcopyrite semiconductors. CHEMISTRY OF MATERIALS. 34 - 6, pp. 2833 - 2841. AMER CHEMICAL SOC, 2022. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.2c00336>>. ISSN 0897-4756, ISSN 1520-5002

DOI: 10.1021/acs.chemmater.2c00336
Handle: 11441/146688
Código WOS: WOS:000790399900032
Código Scopus: 85126150566
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 3
Nº total de autores: 5
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 8.600
Posición de publicación: 38
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 8.600
Posición de publicación: 63
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 2.869
Posición de publicación: 11
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 161
Categoría: Science Edition - MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 342
Categoría: Chemical Engineering (miscellaneous)
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 323
Categoría: Chemistry (miscellaneous)



Índice de impacto: 2.869
Posición de publicación: 27

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 2.869
Posición de publicación: 13

Fuente de citas: SCOPUS
Fuente de citas: WOS

Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 467

Categoría: Materials Chemistry
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 307

Citas: 17
Citas: 16

- 6** Nath, Pinku; Plata, José J.; Santana-Andreo, Julia; Blancas, Ernesto J.; Márquez, Antonio M.; Fernández Sanz, Javier. High-throughput screening of the thermoelastic properties of ultrahigh-temperature ceramics. *ACS APPLIED MATERIALS & INTERFACES*. 13 - 25, pp. 29843 - 29857. AMER CHEMICAL SOC, 2021. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/acsami.1c08832>>. ISSN 1944-8244, ISSN 1944-8252

DOI: 10.1021/acsami.1c08832
Handle: 11441/127851

PMID: 34133122
Código WOS: WOS:000670430100058
Código Scopus: 85110211055

Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 5
Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 10.383
Posición de publicación: 49

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 10.383
Posición de publicación: 23

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 2.143
Posición de publicación: 44

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 2.143
Posición de publicación: 126

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 2.143
Posición de publicación: 11

Fuente de citas: SCOPUS
Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 345

Categoría: Science Edition - NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY

Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 109

Categoría: Materials Science (miscellaneous)
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 586

Categoría: Medicine (miscellaneous)
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 2.488

Categoría: Nanoscience and Nanotechnology
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 79

Citas: 5
Citas: 5

- 7** Plata, José J.; Márquez, Antonio M.; Cuesta-López, Santiago; Fernández Sanz, Javier. Connecting experimental synthetic variables with the microstructure and electronic properties of doped ferroelectric perovskites for solar cell applications using high-throughput frameworks. *ACTA MATERIALIA*. 204, PERGAMON-ELSEVIER SCIENCE LTD, 2021. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2020.11.008>>. ISSN 1359-6454, ISSN 1873-2453

DOI: 10.1016/j.actamat.2020.11.008



Código WOS: WOS:000603994900002

Código Scopus: 85097584891

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 9.209

Posición de publicación: 60

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 9.209

Posición de publicación: 3

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.828

Posición de publicación: 2

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.828

Posición de publicación: 11

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.828

Posición de publicación: 3

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.828

Posición de publicación: 2

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 345

Categoría: Science Edition - METALLURGY & METALLURGICAL ENGINEERING

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 79

Categoría: Ceramics and Composites

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 117

Categoría: Electronic, Optical and Magnetic Materials

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 239

Categoría: Metals and Alloys

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 159

Categoría: Polymers and Plastics

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 164

Citas: 4

Citas: 4

- 8** Paes, Lilian W.C.; Suarez, J. Amaya; Márquez, A. M.; Bernardo da Cruz, A. Gerson; Sanz, Javier Fdez. Electronic structure and adsorption geometry of Pt and Pd metal complexes with 1,3-dithiole-2-thione-4,5-dithiolate ligand on TiO₂(101) surface from first-principles calculations. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS. 138 - 7, SPRINGER, 2019. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1007/s00214-019-2474-6>>. ISSN 1432-881X, ISSN 1432-2234

DOI: 10.1007/s00214-019-2474-6

Código WOS: WOS:000472109300001

Código Scopus: 85066938783

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.498

Posición de publicación: 134

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 0.400

Posición de publicación: 89

Fuente de citas: SCOPUS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 159

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 162

Citas: 2

**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 1

- 9** Kyriakou, Georgios; Márquez, Antonio M.; Holgado, Juan Pedro; Taylor, Martin J.; Wheatley, Andrew E.H.; Mehta, Joshua P.; Fernández Sanz, Javier; Beaumont, Simon K.; Lambert, Richard M.. Comprehensive Experimental and Theoretical Study of the CO plus NO Reaction Catalyzed by Au/Ni Nanoparticles. ACS CATALYSIS. 9 - 6, pp. 4919 - 4929. AMER CHEMICAL SOC, 2019. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/acscatal.8b05154>>. ISSN 2155-5435

DOI: 10.1021/acscatal.8b05154**Handle:** 11441/101553**Código WOS:** WOS:000471212600020**Código Scopus:** 85065861441**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 2**Nº total de autores:** 9**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 12.350**Posición de publicación:** 12**Fuente de impacto:** SCOPUS (SJR)**Índice de impacto:** 4.633**Posición de publicación:** 4**Fuente de impacto:** SCOPUS (SJR)**Índice de impacto:** 4.633**Posición de publicación:** 17**Fuente de citas:** SCOPUS**Fuente de citas:** WOS**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 159**Categoría:** Catalysis**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 55**Categoría:** Chemistry (miscellaneous)**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 435**Citas:** 18**Citas:** 19

- 10** Plata, Jose J.; Suárez, Javier Amaya; Cuesta-López, Santiago; Márquez, Antonio M.; Sanz, Javier Fdez. Photo-sensitizing thin-film ferroelectric oxides using materials databases and high-throughput calculations. JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY A. 7 - 48, pp. 27323 - 27333. ROYAL SOC CHEMISTRY, 2019. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1039/c9ta11820a>>. ISSN 2050-7488, ISSN 2050-7496

DOI: 10.1039/c9ta11820a**Código WOS:** WOS:000502302300011**Código Scopus:** 85076638360**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 4**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 11.301**Posición de publicación:** 17**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 11.301**Posición de publicación:** 8**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 11.301**Posición de publicación:** 24**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 159**Categoría:** Science Edition - ENERGY & FUELS**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 112**Categoría:** Science Edition - MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 314



Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 3.432
Posición de publicación: 23

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 3.432
Posición de publicación: 25

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 3.432
Posición de publicación: 10

Fuente de citas: SCOPUS
Fuente de citas: WOS

Categoría: Chemistry (miscellaneous)
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 435

Categoría: Materials Science (miscellaneous)
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 577

Categoría: Renewable Energy, Sustainability and the Environment
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 174

Citas: 10
Citas: 9

- 11** Plata, J. J.; Remesal, E. R.; Graciani, Jesús; Márquez, A. M.; Rodríguez, J. A.; Sanz, Javier Fernández. Understanding the Photocatalytic Properties of Pt/CeOx/TiO2: Structural Effects on Electronic and Optical Properties. CHEMPHYSICHEM. 20 - 12, pp. 1624 - 1629. WILEY-V C H VERLAG GMBH, 2019. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1002/cphc.201900141>>. ISSN 1439-4235, ISSN 1439-7641

DOI: 10.1002/cphc.201900141

Handle: 11441/100631

PMID: 31046196

Código WOS: WOS:000472541300009

Código Scopus: 85067348906

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 4

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.144
Posición de publicación: 72

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.144
Posición de publicación: 10

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.008
Posición de publicación: 34

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.008
Posición de publicación: 32

Fuente de citas: SCOPUS
Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 159

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 37

Categoría: Atomic and Molecular Physics, and Optics
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 176

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 162

Citas: 6
Citas: 5

- 12** Plata, Jose J.; Pacheco, Laura C.; Remesal, Elena R.; Masa, María O.; Vega, Luis; Márquez, Antonio M.; Odriozola, José A.; Sanz, Javier Fdez. Analysis of the variables that modify the robustness of Ti-SiO2 catalysts for alkene epoxidation: Role of silylation, deactivation and potential solutions. MOLECULAR CATALYSIS. 459, pp. 55 - 60. ELSEVIER SCIENCE BV, 2018. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1016/j.mcat.2018.08.010>>. ISSN 2468-8231

DOI: 10.1016/j.mcat.2018.08.010
Código WOS: WOS:000447580300008
Código Scopus: 85052856456
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 6
Nº total de autores: 8
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.938
Posición de publicación: 67
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 0.999
Posición de publicación: 22
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 0.999
Posición de publicación: 36
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 0.999
Posición de publicación: 10
Fuente de citas: SCOPUS
Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 148

Categoría: Catalysis
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 53

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 155

Categoría: Process Chemistry and Technology
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 67

Citas: 9

Citas: 8

- 13** Plata, Jose J.; Romero-Sarria, Francisca; Amaya Suárez, Javier; Márquez, Antonio M.; Laguna, Óscar H.; Odriozola, José A.; Fdez Sanz, Javier. Improving the activity of gold nanoparticles for the water-gas shift reaction using TiO₂-Y₂O₃: an example of catalyst design. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 20 - 34, pp. 22076 - 22083. ROYAL SOC CHEMISTRY, 2018. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1039/c8cp03706j>>. ISSN 1463-9076, ISSN 1463-9084

DOI: 10.1039/c8cp03706j
Handle: 11441/78332
PMID: 30112549
Código WOS: WOS:000449394100027
Código Scopus: 85052796480
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 4
Nº total de autores: 7
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.567
Posición de publicación: 55
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.567
Posición de publicación: 9
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.310
Posición de publicación: 27
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.310

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 148

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 36

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 155

Categoría: Physics and Astronomy (miscellaneous)
Revista dentro del 25%: Si

**Posición de publicación:** 30**Fuente de citas:** SCOPUS**Fuente de citas:** WOS**Num. revistas en cat.:** 254**Citas:** 6**Citas:** 6

- 14** Torres, Arturo; Amaya Suárez, Javier; Remesal, Elena R.; Márquez, Antonio M.; Fernández Sanz, Javier; Rincón Cañibano, Cristina. Adsorption of Prototypical Asphaltenes on Silica: First-Principles DFT Simulations Including Dispersion Corrections. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 122 - 2, pp. 618 - 624. AMER CHEMICAL SOC, 2018. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b05188>>. ISSN 1520-6106, ISSN 1520-5207

DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b05188**PMID:** 28758747**Código WOS:** WOS:000423140600027**Código Scopus:** 85040783265**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 4**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.923**Posición de publicación:** 69**Fuente de impacto:** SCOPUS (SJR)**Índice de impacto:** 1.109**Posición de publicación:** 28**Fuente de impacto:** SCOPUS (SJR)**Índice de impacto:** 1.109**Posición de publicación:** 461**Fuente de impacto:** SCOPUS (SJR)**Índice de impacto:** 1.109**Posición de publicación:** 33**Fuente de impacto:** SCOPUS (SJR)**Índice de impacto:** 1.109**Posición de publicación:** 16**Fuente de citas:** SCOPUS**Fuente de citas:** WOS**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 148**Categoría:** Materials Chemistry**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 271**Categoría:** Medicine (miscellaneous)**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 2.775**Categoría:** Physical and Theoretical Chemistry**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 155**Categoría:** Surfaces, Coatings and Films**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 120**Citas:** 18**Citas:** 17

- 15** Remesal, Elena R.; Suárez, Javier Amaya; Márquez, Antonio M.; Sanz, Javier Fdez; Rincón, Cristina; Guitián, José. Molecular dynamics simulations of the role of salinity and temperature on the hydrocarbon/water interfacial tension. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS. 136 - 6, SPRINGER, 2017. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1007/s00214-017-2096-9>>. ISSN 1432-881X, ISSN 1432-2234

DOI: 10.1007/s00214-017-2096-9**Handle:** 11441/60726**Código WOS:** WOS:000401343200001**Código Scopus:** 85027872576**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 3**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL



Índice de impacto: 1.545
Posición de publicación: 106

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 0.564
Posición de publicación: 74

Fuente de citas: SCOPUS
Fuente de citas: WOS

Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 147

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 151

Citas: 16
Citas: 14

- 16** Orozco, Noé; Kyriakou, Georgios; Beaumont, Simon K.; Fernandez Sanz, Javier; Holgado, Juan P.; Taylor, Martin J.; Espinós, Juan P.; Márquez, Antonio M.; Watson, David J.; Gonzalez-Elipe, Agustin R.; Lambert, Richard M.. Critical Role of Oxygen in Silver-Catalyzed Glaser-Hay Coupling on Ag(100) under Vacuum and in Solution on Ag Particles. ACS CATALYSIS. 7 - 5, pp. 3113 - 3120. AMER CHEMICAL SOC, 2017. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/acscatal.7b00431>>. ISSN 2155-5435

DOI: 10.1021/acscatal.7b00431

Handle: 11441/133970

Código WOS: WOS:000401054300003

Código Scopus: 85020227163

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 8

Nº total de autores: 11

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 11.384

Posición de publicación: 13

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 4.921

Posición de publicación: 3

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 147

Categoría: Catalysis

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 48

Citas: 8

Citas: 7

- 17** Suárez, Javier Amaya; Plata, Jose J.; Márquez, Antonio M.; Sanz, Javier Fdez. Effects of the capping ligands, linkers and oxide surface on the electron injection mechanism of copper sulfide quantum dot-sensitized solar cells. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 19 - 22, pp. 14580 - 14587. ROYAL SOC CHEMISTRY, 2017. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1039/c7cp01076a>>. ISSN 1463-9076, ISSN 1463-9084

DOI: 10.1039/c7cp01076a

Handle: 11441/61305

PMID: 28537283

Código WOS: WOS:000403327200040

Código Scopus: 85021876070

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.906

Posición de publicación: 46

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.906

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 147

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC,
MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

**Posición de publicación:** 9**Fuente de impacto:** SCOPUS (SJR)**Índice de impacto:** 1.686**Posición de publicación:** 20**Fuente de impacto:** SCOPUS (SJR)**Índice de impacto:** 1.686**Posición de publicación:** 24**Fuente de citas:** SCOPUS**Fuente de citas:** WOS**Num. revistas en cat.:** 37**Categoría:** Physical and Theoretical Chemistry**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 151**Categoría:** Physics and Astronomy (miscellaneous)**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 250**Citas:** 11**Citas:** 9

- 18** Amaya Suárez, Javier; Plata, Jose J.; Márquez, Antonio M.; Fernández Sanz, Javier. Ag2S Quantum Dot-Sensitized Solar Cells by First Principles: The Effect of Capping Ligands and Linkers. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 121 - 38, pp. 7290 - 7296. AMER CHEMICAL SOC, 2017. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/acs.jpca.7b07731>>. ISSN 1089-5639, ISSN 1520-5215

DOI: 10.1021/acs.jpca.7b07731**PMID:** 28880557**Código WOS:** WOS:000412149600025**Código Scopus:** 85030326572**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 3**Nº total de autores:** 4**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.836**Posición de publicación:** 69**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.836**Posición de publicación:** 14**Fuente de impacto:** SCOPUS (SJR)**Índice de impacto:** 1.170**Posición de publicación:** 449**Fuente de impacto:** SCOPUS (SJR)**Índice de impacto:** 1.170**Posición de publicación:** 31**Fuente de citas:** SCOPUS**Fuente de citas:** WOS**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 147**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 37**Categoría:** Medicine (miscellaneous)**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 2.765**Categoría:** Physical and Theoretical Chemistry**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 151**Citas:** 16**Citas:** 15

- 19** Martín, Victoria Isabel; Ostos, Francisco José; Angulo, Manuel; Márquez, Antonio M.; López-Cornejo, Pilar; López-López, Manuel; Carmona, Ana Teresa; Moyá, María Luisa. Host-guest interactions between cyclodextrins and surfactants with functional groups at the end of the hydrophobic tail. JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE. 491, pp. 336 - 348. ACADEMIC PRESS INC ELSEVIER SCIENCE, 2017. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1016/j.jcis.2016.12.040>>. ISSN 0021-9797, ISSN 1095-7103

DOI: 10.1016/j.jcis.2016.12.040**Handle:** 11441/52850**PMID:** 28056443**Código WOS:** WOS:000393149500037



Código Scopus: 85007610415
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 4
Nº total de autores: 8
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 5.091
Posición de publicación: 33

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.221
Posición de publicación: 17

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.221
Posición de publicación: 4

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.221
Posición de publicación: 32

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.221
Posición de publicación: 15

Fuente de citas: SCOPUS
Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 147

Categoría: Biomaterials
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 78

Categoría: Colloid and Surface Chemistry
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 14

Categoría: Electronic, Optical and Magnetic Materials
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 211

Categoría: Surfaces, Coatings and Films
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 114

Citas: 17
Citas: 16

- 20** Márquez, Antonio M.; Pacheco, Laura C.; Sanz, Javier Fdez. Structural and electronic properties of lead sulfide quantum dots from screened hybrid density functional calculations including spin-orbit coupling effects. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS. 136 - 5, pp. 58-1 - 58-7. SPRINGER, 2017. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1007/s00214-017-2085-z>>. ISSN 1432-881X, ISSN 1432-2234
DOI: 10.1007/s00214-017-2085-z
Handle: 11441/60730
Código WOS: WOS:000404248100002
Código Scopus: 85017624092
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 1
Nº total de autores: 3
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.545
Posición de publicación: 106

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 0.564
Posición de publicación: 74

Fuente de citas: SCOPUS
Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Autor de correspondencia: Si
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 147

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 151

Citas: 3
Citas: 3



- 21** Paes, L. W.C.; Suárez, J. Amaya; Márquez, A. M.; Sanz, Javier Fdez. First-principles study of nickel complex with 1,3-dithiole-2-thione-4,5-dithiolate ligands as model photosensitizers. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS. 136 - 6, pp. 1 - 9. SPRINGER, 2017. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1007/s00214-017-2098-7>>. ISSN 1432-881X, ISSN 1432-2234
DOI: 10.1007/s00214-017-2098-7
Handle: 11441/60428
Código WOS: WOS:000404250600001
Código Scopus: 85019475538
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 3
Nº total de autores: 4
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.545
Posición de publicación: 106
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 0.564
Posición de publicación: 74
Fuente de citas: SCOPUS
Fuente de citas: WOS
- Tipo de soporte:** Revista
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 147
Categoría: Physical and Theoretical Chemistry
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 151
Citas: 6
Citas: 7
- 22** Remesal, Elena R.; Amaya, Javier; Graciani, Jesús; Márquez, Antonio M.; Sanz, Javier Fdez. Adsorption of prototypical amino acids on silica: Influence of the pre-adsorbed water multilayer. SURFACE SCIENCE. 646, pp. 239 - 246. ELSEVIER SCIENCE BV, 2016. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1016/j.susc.2015.07.012>>. ISSN 0039-6028, ISSN 1879-2758
DOI: 10.1016/j.susc.2015.07.012
Código WOS: WOS:000374916900033
Código Scopus: 84937485148
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 4
Nº total de autores: 5
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.062
Posición de publicación: 82
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.062
Posición de publicación: 32
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 0.746
Posición de publicación: 110
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 0.746
Posición de publicación: 50
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 0.746
Posición de publicación: 16
- Tipo de soporte:** Revista
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 146
Categoría: Science Edition - PHYSICS, CONDENSED MATTER
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 67
Categoría: Condensed Matter Physics
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 399
Categoría: Materials Chemistry
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 258
Categoría: Surfaces and Interfaces
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 48



Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 0.746

Posición de publicación: 24

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Categoría: Surfaces, Coatings and Films

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 111

Citas: 9

Citas: 9

- 23** Suárez, Javier Amaya; Plata, José J.; Márquez, Antonio M.; Sanz, Javier Fernández. Structural, electronic and optical properties of copper, silver and gold sulfide: a DFT study. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS. 135 - 3, pp. 1 - 8. SPRINGER, 2016. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1007/s00214-016-1832-x>>. ISSN 1432-881X, ISSN 1432-2234

DOI: 10.1007/s00214-016-1832-x

Código WOS: WOS:000371328600001

Código Scopus: 84975770130

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.890

Posición de publicación: 86

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 0.527

Posición de publicación: 79

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 146

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 150

Citas: 31

Citas: 33

- 24** Romero-Sarria, F.; Plata, J. J.; Laguna, O. H.; Márquez, A. M.; Centeno, M. A.; Sanz, J. Fdez; Odriozola, J. A.. Surface oxygen vacancies in gold based catalysts for CO oxidation. RSC ADVANCES. 4 - 25, pp. 13145 - 13152. ROYAL SOC CHEMISTRY, 2014. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1039/c3ra46662k>>. ISSN 2046-2069

DOI: 10.1039/c3ra46662k

Handle: 11441/56065

Código WOS: WOS:000332485000063

Código Scopus: 84896770965

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 4

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.840

Posición de publicación: 33

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 1.113

Posición de publicación: 29

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 1.113

Posición de publicación: 59

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 157

Categoría: Chemical Engineering (miscellaneous)

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 309

Categoría: Chemistry (miscellaneous)

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 420

**Fuente de citas:** SCOPUS**Citas:** 25**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 24

- 25** Plata, José J.; Márquez, Antonio M.; Sanz, Javier Fdez. Understanding the Interplay of Dopants, Interfaces, and Anionic Conductivity in Doped Ceria/Zirconia Heteroepitaxial Structures. CHEMISTRY OF MATERIALS. 26 - 11, pp. 3385 - 3390. AMER CHEMICAL SOC, 2014. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/cm500415h>>. ISSN 0897-4756, ISSN 1520-5002

DOI: 10.1021/cm500415h**Código WOS:** WOS:000337199400009**Código Scopus:** 84902154780**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 2**Nº total de autores:** 3**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 8.354**Posición de publicación:** 15**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 8.354**Posición de publicación:** 17**Fuente de impacto:** SCOPUS (SJR)**Índice de impacto:** 3.595**Posición de publicación:** 4**Fuente de impacto:** SCOPUS (SJR)**Índice de impacto:** 3.595**Posición de publicación:** 13**Fuente de impacto:** SCOPUS (SJR)**Índice de impacto:** 3.595**Posición de publicación:** 5**Fuente de citas:** SCOPUS**Fuente de citas:** WOS**Tipo de soporte:** Revista**Autor de correspondencia:** Si**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 139**Categoría:** Science Edition - MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 260**Categoría:** Chemical Engineering (miscellaneous)**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 309**Categoría:** Chemistry (miscellaneous)**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 420**Categoría:** Materials Chemistry**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 254**Citas:** 16**Citas:** 14

- 26** Plata, José J.; Márquez, Antonio M.; Sanz, Javier Fdez. Transport Properties in the CeO₂-x(111) Surface: From Charge Distribution to Ion-Electron Collaborative Migration. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. 117 - 48, pp. 25497 - 25503. AMER CHEMICAL SOC, 2013. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/jp4066532>>. ISSN 1932-7447, ISSN 1932-7455

DOI: 10.1021/jp4066532**Código WOS:** WOS:000328101200033**Código Scopus:** 84890337809**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 2**Nº total de autores:** 3**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.835**Posición de publicación:** 29**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 136



Índice de impacto: 4.835
Posición de publicación: 29

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.835
Posición de publicación: 19

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 2.143
Posición de publicación: 15

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 2.143
Posición de publicación: 6

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 2.143
Posición de publicación: 15

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 2.143
Posición de publicación: 14

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 2.143
Posición de publicación: 5

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Categoría: Science Edition - MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 251

Categoría: Science Edition - NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY

Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 73

Categoría: Electronic, Optical and Magnetic Materials

Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 191

Categoría: Energy (miscellaneous)

Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 87

Categoría: Nanoscience and Nanotechnology

Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 93

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry

Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 150

Categoría: Surfaces, Coatings and Films

Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 99

Citas: 44

Citas: 38

- 27** Plata, José J.; Márquez, Antonio M.; Sanz, Javier Fdez. Electron Mobility via Polaron Hopping in Bulk Ceria: A First-Principles Study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. 117 - 28, pp. 14502 - 14509. AMER CHEMICAL SOC, 2013. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/jp402594x>>. ISSN 1932-7447, ISSN 1932-7455
DOI: 10.1021/jp402594x

Código WOS: WOS:000322150100006

Código Scopus: 84880528448

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.835

Posición de publicación: 29

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.835

Posición de publicación: 29

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.835

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 136

Categoría: Science Edition - MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 251

Categoría: Science Edition - NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY

Revista dentro del 25%: No



Posición de publicación: 19

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.143

Posición de publicación: 15

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.143

Posición de publicación: 6

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.143

Posición de publicación: 15

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.143

Posición de publicación: 14

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.143

Posición de publicación: 5

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Num. revistas en cat.: 73

Categoría: Electronic, Optical and Magnetic Materials

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 191

Categoría: Energy (miscellaneous)

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 87

Categoría: Nanoscience and Nanotechnology

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 93

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 150

Categoría: Surfaces, Coatings and Films

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 99

Citas: 70

Citas: 65

- 28** Plata, José J.; Collico, Veronica; Márquez, Antonio M.; Sanz, Javier Fdez. Analysis of the origin of lateral interactions in the adsorption of small organic molecules on oxide surfaces. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS. 132 - 2, pp. 1 - 7. SPRINGER, 2013. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1007/s00214-012-1311-y>>. ISSN 1432-881X, ISSN 1432-2234

DOI: 10.1007/s00214-012-1311-y

Código WOS: WOS:000318294700005

Código Scopus: 84871434856

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.143

Posición de publicación: 70

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 0.792

Posición de publicación: 55

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 136

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 150

Citas: 5

Citas: 5

- 29** Zayed, Ala'; Márquez, Antonio M.; Sanz, Javier Fdez. Nanosized CoO Films on the alpha-Al₂O₃ (0001) Surface: A Density Functional Study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. 117 - 44, pp. 22714 - 22722. AMER CHEMICAL SOC, 2013. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/jp406016z>>. ISSN 1932-7447, ISSN 1932-7455

DOI: 10.1021/jp406016z

Código WOS: WOS:000326845400030

Código Scopus: 84889854674



Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.835

Posición de publicación: 29

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.835

Posición de publicación: 29

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.835

Posición de publicación: 19

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.143

Posición de publicación: 15

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.143

Posición de publicación: 6

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.143

Posición de publicación: 15

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.143

Posición de publicación: 14

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.143

Posición de publicación: 5

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Autor de correspondencia: Si

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 136

Categoría: Science Edition - MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 251

Categoría: Science Edition - NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 73

Categoría: Electronic, Optical and Magnetic Materials

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 191

Categoría: Energy (miscellaneous)

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 87

Categoría: Nanoscience and Nanotechnology

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 93

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 150

Categoría: Surfaces, Coatings and Films

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 99

Citas: 6

Citas: 6

30 Plata, José J.; Márquez, Antonio M.; Sanz, Javier Fdez. Communication: Improving the density functional theory plus U description of CeO₂ by including the contribution of the O 2p electrons. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 136 - 4, pp. 041101 - 041105. AMER INST PHYSICS, 2012. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1063/1.3678309>>. ISSN 0021-9606, ISSN 1089-7690

DOI: 10.1063/1.3678309

Handle: 11441/49380

Código WOS: WOS:000299793700001

Código Scopus: 84861632270

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL



Índice de impacto: 3.164
Posición de publicación: 8

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.832
Posición de publicación: 189

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.832
Posición de publicación: 21

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.832
Posición de publicación: 23

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 34

Categoría: Medicine (miscellaneous)
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 2.833

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 149

Categoría: Physics and Astronomy (miscellaneous)
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 243

Citas: 61

Citas: 58

- 31** Márquez, Antonio M.; Plata, José J.; Ortega, Yanaris; Sanz, Javier Fdez; Colón, Gerardo; Kubacka, Anna; Fernández-García, Marcos. Making Photo-selective TiO₂ Materials by Cation-Anion Codoping: From Structure and Electronic Properties to Photoactivity. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. 116 - 35, pp. 18759 - 18767. AMER CHEMICAL SOC, 2012. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/jp3045143>>. ISSN 1932-7447, ISSN 1932-7455

DOI: 10.1021/jp3045143

Código WOS: WOS:000308339600026

Código Scopus: 84865958987

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.814

Posición de publicación: 28

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.814

Posición de publicación: 27

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.814

Posición de publicación: 19

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.529

Posición de publicación: 14

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.529

Posición de publicación: 3

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.529

Posición de publicación: 12

Tipo de soporte: Revista

Autor de correspondencia: Si

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 135

Categoría: Science Edition - MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 241

Categoría: Science Edition - NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 69

Categoría: Electronic, Optical and Magnetic Materials

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 181

Categoría: Energy (miscellaneous)

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 82

Categoría: Nanoscience and Nanotechnology

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 93



Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 2.529
Posición de publicación: 11

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 2.529
Posición de publicación: 4

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 149

Categoría: Surfaces, Coatings and Films
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 97

Citas: 27

Citas: 22

- 32** Plata, José J.; Ruiz-Tagle, Igor; Márquez, Antonio M.; Sanz, Javier Fdez. Ceria(100) Nanotubes with Negative Strain Energy: A First-Principles Prediction. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS. 3 - 15, pp. 2092 - 2096. AMER CHEMICAL SOC, 2012. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/jz300731n>>. ISSN 1948-7185

DOI: 10.1021/jz300731n

Código WOS: WOS:000309691500030

Código Scopus: 84864755787

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 6.585

Posición de publicación: 15

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 6.585

Posición de publicación: 18

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 6.585

Posición de publicación: 11

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 6.585

Posición de publicación: 1

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 3.965

Posición de publicación: 13

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 3.965

Posición de publicación: 8

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 135

Categoría: Science Edition - MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 241

Categoría: Science Edition - NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 69

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 34

Categoría: Materials Science (miscellaneous)

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 502

Categoría: Nanoscience and Nanotechnology

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 93

Citas: 4

Citas: 4



- 33** Plata, José J.; Márquez, Antonio M.; Sanz, Javier Fdez; Avellaneda, Rafael Sánchez; Romero-Sarria, Francisca; Domínguez, María Isabel; Centeno, Miguel Angel; Odriozola, José Antonio. Gold Nanoparticles on Yttrium Modified Titania: Support Properties and Catalytic Activity. TOPICS IN CATALYSIS. 54 - 1-4, pp. 219 - 228. SPRINGER, 2011. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1007/s11244-011-9639-4>>. ISSN 1022-5528, ISSN 1572-9028
DOI: 10.1007/s11244-011-9639-4
Handle: 11441/82548
Código WOS: WOS:000287496100027
Código Scopus: 79951958790
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 2
Nº total de autores: 8
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.624
Posición de publicación: 13
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.624
Posición de publicación: 51
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.338
Posición de publicación: 14
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.338
Posición de publicación: 48
Fuente de citas: SCOPUS
Fuente de citas: WOS
- Tipo de soporte:** Revista
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, APPLIED
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 71
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 134
Categoría: Catalysis
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 37
Categoría: Chemistry (miscellaneous)
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 413
Citas: 23
Citas: 23
- 34** Sanchez-de-Armas, R; San-Miguel, MA; Oviedo, J; Marquez, A; Sanz, JF. Electronic structure and optical spectra of catechol on TiO₂ nanoparticles from real time TD-DFT simulations. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 13 - 4, pp. 1506 - 1514. ROYAL SOC CHEMISTRY, 2011. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1039/c0cp00906g>>. ISSN 1463-9076, ISSN 1463-9084
DOI: 10.1039/c0cp00906g
Código WOS: WOS:000286056400030
Código Scopus: 78651309940
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 4
Nº total de autores: 5
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.573
Posición de publicación: 34
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.573
Posición de publicación: 5
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.707
Posición de publicación: 24
- Tipo de soporte:** Revista
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 134
Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 33
Categoría: Physical and Theoretical Chemistry
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 145



Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 1.707

Posición de publicación: 27

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Categoría: Physics and Astronomy (miscellaneous)

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 232

Citas: 98

Citas: 88

- 35** Márquez, Antonio M.; Plata, José J.; Ortega, Yanaris; Fdez. Sanz, Javier. Structural Defects in W-Doped TiO₂ (101) Anatase Surface: Density Functional Study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. 115 - 34, pp. 16970 - 16976. AMER CHEMICAL SOC, 2011. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/jp203223f>>. ISSN 1932-7447, ISSN 1932-7455

DOI: 10.1021/jp203223f

Código WOS: WOS:000294146700031

Código Scopus: 80052155532

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.805

Posición de publicación: 26

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.805

Posición de publicación: 23

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.805

Posición de publicación: 17

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.339

Posición de publicación: 16

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.339

Posición de publicación: 6

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.339

Posición de publicación: 13

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.339

Posición de publicación: 12

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.339

Posición de publicación: 4

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Autor de correspondencia: Si

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 134

Categoría: Science Edition - MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 232

Categoría: Science Edition - NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 66

Categoría: Electronic, Optical and Magnetic Materials

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 177

Categoría: Energy (miscellaneous)

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 75

Categoría: Nanoscience and Nanotechnology

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 90

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 145

Categoría: Surfaces, Coatings and Films

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 104

Citas: 32

Citas: 36



- 36** Plata, José Javier; Collico, Veronica; Márquez, Antonio M.; Sanz, Javier Fdez. Understanding Acetaldehyde Thermal Chemistry on the TiO₂ (110) Rutile Surface: From Adsorption to Reactivity. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. 115 - 6, pp. 2819 - 2825. AMER CHEMICAL SOC, 2011. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/jp110696f>>. ISSN 1932-7447, ISSN 1932-7455
DOI: 10.1021/jp110696f
Código WOS: WOS:000287065700027
Código Scopus: 79951518479
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 3
Nº total de autores: 4
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.805
Posición de publicación: 26
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.805
Posición de publicación: 23
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.805
Posición de publicación: 17
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 2.339
Posición de publicación: 16
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 2.339
Posición de publicación: 6
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 2.339
Posición de publicación: 13
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 2.339
Posición de publicación: 12
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 2.339
Posición de publicación: 4
Fuente de citas: SCOPUS
Fuente de citas: WOS
- Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: Si
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 134
Categoría: Science Edition - MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 232
Categoría: Science Edition - NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 66
Categoría: Electronic, Optical and Magnetic Materials
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 177
Categoría: Energy (miscellaneous)
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 75
Categoría: Nanoscience and Nanotechnology
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 90
Categoría: Physical and Theoretical Chemistry
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 145
Categoría: Surfaces, Coatings and Films
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 104
Citas: 21
Citas: 21
- 37** Graciani, Jesús; Márquez, Antonio M.; Plata, José J.; Ortega, Yanaris; Cruz Hernández, Norge; Meyer, Alessio; Zicovich-Wilson, Claudio M.; Fernández Sanz, Javier. Comparative study on the performance of hybrid DFT functionals in highly correlated oxides: the case of CeO₂ and Ce₂O₃. JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION. 7 - 1, pp. 56 - 65. AMER CHEMICAL SOC, 2011. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/ct100430q>>. ISSN 1549-9618, ISSN 1549-9626
DOI: 10.1021/ct100430q

Código WOS: WOS:000285990300007

Código Scopus: 78651362113

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 8

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 5.215

Posición de publicación: 22

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 5.215

Posición de publicación: 2

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.770

Posición de publicación: 6

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.770

Posición de publicación: 8

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 134

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 33

Categoría: Computer Science Applications

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 471

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 145

Citas: 118

Citas: 115

- 38** Márquez, Antonio M.; Graciani, Jesús; Sanz, Javier Fdez. Charge state of metal atoms on oxide supports: a systematic study based on simulated infrared spectroscopy and density functional theory. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS. 126 - 3-4, pp. 265 - 273. SPRINGER, 2010. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1007/s00214-009-0703-0>>. ISSN 1432-881X, ISSN 1432-2234

DOI: 10.1007/s00214-009-0703-0

Código WOS: WOS:000278473900016

Código Scopus: 77953476054

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Nº total de autores: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.903

Posición de publicación: 43

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 1.320

Posición de publicación: 28

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Autor de correspondencia: Si

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 127

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 146

Citas: 19

Citas: 20

- 39** Graciani, Jesús; Sanz, Javier Fernández; Márquez, Antonio M.. A Density Functional Study of Initial Steps in the Oxidation of Early Transition Metal Nitrides, MN (M = Sc, Ti, and V). JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. 113 - 3, pp. 930 - 938. AMER CHEMICAL SOC, 2009. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/jp804266z>>. ISSN 1932-7447, ISSN 1932-7455

DOI: 10.1021/jp804266z

Código WOS: WOS:000262522000021



Código Scopus: 64549097010
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 3
Nº total de autores: 3
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.224
Posición de publicación: 22

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.224
Posición de publicación: 22

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.224
Posición de publicación: 14

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 2.158
Posición de publicación: 15

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 2.158
Posición de publicación: 4

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 2.158
Posición de publicación: 11

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 2.158
Posición de publicación: 15

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 2.158
Posición de publicación: 5

Fuente de citas: SCOPUS
Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 121

Categoría: Science Edition - MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 214

Categoría: Science Edition - NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 59

Categoría: Electronic, Optical and Magnetic Materials
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 177

Categoría: Energy (miscellaneous)
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 65

Categoría: Nanoscience and Nanotechnology
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 68

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 145

Categoría: Surfaces, Coatings and Films
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 109

Citas: 12

Citas: 12

40 Márquez, Antonio M.; Plata, José J.; Sanz, Javier Fdez. Role of Coverage and Surface Oxidation Degree in the Adsorption of Acetone on TiO₂ (110). A Density Functional Study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. 113 - 46, pp. 19973 - 19980. AMER CHEMICAL SOC, 2009. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/jp906643h>>. ISSN 1932-7447, ISSN 1932-7455

DOI: 10.1021/jp906643h

Código WOS: WOS:000271583600029

Código Scopus: 72149107864

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Nº total de autores: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.224

Tipo de soporte: Revista

Autor de correspondencia: Si

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si



Posición de publicación: 22

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.224

Posición de publicación: 22

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.224

Posición de publicación: 14

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.158

Posición de publicación: 15

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.158

Posición de publicación: 4

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.158

Posición de publicación: 11

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.158

Posición de publicación: 15

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.158

Posición de publicación: 5

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Num. revistas en cat.: 121

Categoría: Science Edition - MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 214

Categoría: Science Edition - NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 59

Categoría: Electronic, Optical and Magnetic Materials

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 177

Categoría: Energy (miscellaneous)

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 65

Categoría: Nanoscience and Nanotechnology

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 68

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 145

Categoría: Surfaces, Coatings and Films

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 109

Citas: 22

Citas: 24

41 Sanz, Javier Fdez; Márquez, A.. Adsorption of Pd atoms and dimers on the TiO₂ (110) surface: A first principles study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. 111 - 10, pp. 3949 - 3955. AMER CHEMICAL SOC, 2007. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/jp0639952>>. ISSN 1932-7447, ISSN 1932-7455

DOI: 10.1021/jp0639952

Código WOS: WOS:000245006100021

Código Scopus: 34147184734

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 2

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 0.000

Posición de publicación: 111

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 0.000

Posición de publicación: 186

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 111

Categoría: Science Edition - MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 190

Índice de impacto: 0.000
Posición de publicación: 43
Fuente de citas: SCOPUS
Fuente de citas: WOS

Categoría: Science Edition - NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 47
Citas: 55
Citas: 54

- 42** Sanz, Javier Fernández; Márquez, Antonio M.. Structure and dynamics of methyl-substituted beryllocene: [Be(C5Me5)(2)]. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS. 116 - 4-5, pp. 480 - 485. SPRINGER, 2006. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1007/s00214-006-0084-6>>. ISSN 1432-881X, ISSN 1432-2234

DOI: 10.1007/s00214-006-0084-6
Código WOS: WOS:000240062400013
Código Scopus: 33747856690

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 2

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.446

Posición de publicación: 35

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 1.401

Posición de publicación: 29

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Autor de correspondencia: Si

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 108

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 142

Citas: 6

Citas: 5

- 43** Graciani, Jesús; Márquez, Antonio; Sanz, Javier Fdez. Role of vacancies in the structural stability of alpha-TiO: A first-principles study based on density-functional calculations. PHYSICAL REVIEW B. 72 - 5, pp. 1 - 6. AMER PHYSICAL SOC, 2005. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.054117>>. ISSN 2469-9950, ISSN 2469-9969, ISSN 1098-0121, ISSN 1550-235X

DOI: 10.1103/PhysRevB.72.054117

Handle: 11441/48572

Código WOS: WOS:000231564300054

Código Scopus: 84865459500

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.185

Posición de publicación: 7

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.126

Posición de publicación: 16

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.126

Posición de publicación: 11

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - PHYSICS, CONDENSED MATTER

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 60

Categoría: Condensed Matter Physics

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 367

Categoría: Electronic, Optical and Magnetic Materials

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 156

**Fuente de citas:** SCOPUS**Citas:** 47**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 46

- 44** Piquemal, Jean Philip; Marquez, Antonio; Parisel, Olivier; Giessner-Prettre, Claude. A CSOV study of the difference between HF and DFT intermolecular interaction energy values: The importance of the charge transfer contribution. JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY. 26 - 10, pp. 1052 - 1062. John Wiley & Sons, Inc., 2005. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1002/jcc.20242>>. ISSN 0192-8651, ISSN 1096-987X
DOI: 10.1002/jcc.20242
PMID: 15898112
Código WOS: WOS:000229702900009
Código Scopus: 23044473290
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 2
Nº total de autores: 4
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.786
Posición de publicación: 13
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 2.039
Posición de publicación: 18
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 2.039
Posición de publicación: 7
Fuente de citas: SCOPUS
Fuente de citas: WOS
- Tipo de soporte:** Revista
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 125
Categoría: Chemistry (miscellaneous)
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 365
Categoría: Computational Mathematics
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 68
Citas: 100
Citas: 97
- 45** Hernández, N.C.; Graciani, J.; Márquez, A.; Sanz, J.F.. Cu, Ag and Au atoms deposited on the alpha-Al2O3(0001) surface: a comparative density functional study. SURFACE SCIENCE. 575 - 1-2, pp. 189 - 196. ELSEVIER SCIENCE BV, 2005. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1016/j.susc.2004.11.022>>. ISSN 0039-6028, ISSN 1879-2758
DOI: 10.1016/j.susc.2004.11.022
Código WOS: WOS:000226822900023
Código Scopus: 12244310190
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 3
Nº total de autores: 4
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.780
Posición de publicación: 48
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.780
Posición de publicación: 15
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.460
Posición de publicación: 42
- Tipo de soporte:** Revista
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 111
Categoría: Science Edition - PHYSICS, CONDENSED MATTER
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 60
Categoría: Condensed Matter Physics
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 367



Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.460
Posición de publicación: 18

Categoría: Materials Chemistry
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 236

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.460
Posición de publicación: 10

Categoría: Surfaces and Interfaces
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 53

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.460
Posición de publicación: 6

Categoría: Surfaces, Coatings and Films
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 105

Fuente de citas: SCOPUS

Citas: 63

Fuente de citas: WOS

Citas: 62

- 46** Cruz Hernández, Norge; Márquez Cruz, Antonio M.; Fernández Sanz, Javier; Gomes, J. R.B.; Illas, F.. Density functional theory study of Co, Rh, and Ir atoms deposited on the alpha-Al₂O₃(0001) surface. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 108 - 40, pp. 15671 - 15678. AMER CHEMICAL SOC, 2004. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/jp048245b>>. ISSN 1520-6106, ISSN 1520-5207

DOI: 10.1021/jp048245b

Código WOS: WOS:000224213500033

Código Scopus: 6944242745

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 3.834

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 15

Num. revistas en cat.: 108

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Categoría: Materials Chemistry

Índice de impacto: 2.199

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 6

Num. revistas en cat.: 231

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Categoría: Medicine (miscellaneous)

Índice de impacto: 2.199

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 62

Num. revistas en cat.: 2.778

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry

Índice de impacto: 2.199

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 11

Num. revistas en cat.: 137

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Categoría: Surfaces, Coatings and Films

Índice de impacto: 2.199

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 2

Num. revistas en cat.: 101

Fuente de citas: SCOPUS

Citas: 30

Fuente de citas: WOS

Citas: 27

- 47** Márquez, Antonio M.; Sanz, Javier Fernández. Adsorption of Pd atoms on gamma-Al₂O₃: a density functional study of metal-support interactions. APPLIED SURFACE SCIENCE. 238 - 1-4, pp. 82 - 85. ELSEVIER SCIENCE BV, 2004. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2004.05.188>>. ISSN 0169-4332, ISSN 1873-5584



DOI: 10.1016/j.apsusc.2004.05.188
Código WOS: WOS:000224655200015
Código Scopus: 4644346482
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 1
Nº total de autores: 2
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.497
Posición de publicación: 58

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.497
Posición de publicación: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.497
Posición de publicación: 28

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.497
Posición de publicación: 24

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 0.984
Posición de publicación: 19

Fuente de citas: SCOPUS
Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Autor de correspondencia: Si
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 108

Categoría: Science Edition - MATERIALS SCIENCE, COATINGS & FILMS
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 19

Categoría: Science Edition - PHYSICS, APPLIED
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 79

Categoría: Science Edition - PHYSICS, CONDENSED MATTER
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 60

Categoría: Surfaces, Coatings and Films
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 101

Citas: 27
Citas: 27

- 48** Espinosa-García, Joaquín; Márquez, Antonio; Dóbé, Sándor. Theoretical enthalpy of formation of the acetonyl radical. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 373 - 3-4, pp. 350 - 356. ELSEVIER SCIENCE BV, 2003. Disponible en Internet en: <[https://doi.org/10.1016/S0009-2614\(03\)00551-7](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(03)00551-7)>. ISSN 0009-2614, ISSN 1873-4448

DOI: 10.1016/S0009-2614(03)00551-7
Código WOS: WOS:000183016300019
Código Scopus: 17044447931
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 2
Nº total de autores: 3
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.438
Posición de publicación: 7

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.639
Posición de publicación: 18

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.639
Posición de publicación: 28

Fuente de citas: SCOPUS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 33

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 134

Categoría: Physics and Astronomy (miscellaneous)
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 177

Citas: 16

**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 16

- 49** Espinosa-García, J.; Márquez Cruz, A.. Theoretical study of the [ClHCl] pre-reactive complex. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 377 - 5-6, pp. 613 - 619. ELSEVIER SCIENCE BV, 2003. Disponible en Internet en: <[https://doi.org/10.1016/S0009-2614\(03\)01201-6](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(03)01201-6)>. ISSN 0009-2614, ISSN 1873-4448

DOI: 10.1016/S0009-2614(03)01201-6**Código WOS:** WOS:000184995300022**Código Scopus:** 0141565494**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 2**Nº total de autores:** 2**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.438**Posición de publicación:** 7**Fuente de impacto:** SCOPUS (SJR)**Índice de impacto:** 1.639**Posición de publicación:** 18**Fuente de impacto:** SCOPUS (SJR)**Índice de impacto:** 1.639**Posición de publicación:** 28**Fuente de citas:** SCOPUS**Fuente de citas:** WOS**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 33**Categoría:** Physical and Theoretical Chemistry**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 134**Categoría:** Physics and Astronomy (miscellaneous)**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 177**Citas:** 3**Citas:** 3

- 50** Del Mar Conejo, M.; Fernández, Rafael; Del Río, Diego; Carmona, Ernesto; Monge, Angeles; Ruiz, Caridad; Márquez, Antonio M.; Fernández Sanz, Javier. Synthesis, solid-state structure, and bonding analysis of the beryllocenes [Be(C5Me4H)(2)], [Be(Be5C5Me5)(2)], and [Be(C5Me5)(C5Me4H)]. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. 9 - 18, pp. 4452 - 4461. WILEY-V C H VERLAG GMBH, 2003. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1002/chem.200304876>>. ISSN 0947-6539, ISSN 1521-3765

DOI: 10.1002/chem.200304876**Código WOS:** WOS:000185583400020**Código Scopus:** 0141450318**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 7**Nº total de autores:** 8**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.353**Posición de publicación:** 8**Fuente de impacto:** SCOPUS (SJR)**Índice de impacto:** 2.365**Posición de publicación:** 15**Fuente de citas:** SCOPUS**Fuente de citas:** WOS**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 123**Categoría:** Chemistry (miscellaneous)**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 353**Citas:** 33**Citas:** 23



- 51** Ledecq, M; Lebon, F; Durant, F; Giessner-Prettre, C; Marquez, A; Gresh, N. Modeling of copper(II) complexes with the SIBFA polarizable molecular mechanics procedure. Application to a new class of HIV-1 protease inhibitors. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 107 - 38, pp. 10640 - 10652. AMER CHEMICAL SOC, 2003. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/jp0354604>>. ISSN 1520-6106, ISSN 1520-5207

DOI: 10.1021/jp0354604

Código WOS: WOS:000185401900048

Código Scopus: 0141959772

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 5

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.679

Posición de publicación: 13

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.163

Posición de publicación: 7

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.163

Posición de publicación: 64

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.163

Posición de publicación: 13

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.163

Posición de publicación: 3

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 101

Categoría: Materials Chemistry

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 227

Categoría: Medicine (miscellaneous)

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 2.795

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 134

Categoría: Surfaces, Coatings and Films

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 101

Citas: 34

Citas: 30

- 52** Rak, Janusz; Voityuk, Alexander A.; Marquez, Antonio; Rösch, Notker. The effect of pyrimidine bases on the hole-transfer coupling in DNA. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 106 - 32, pp. 7919 - 7926. AMER CHEMICAL SOC, 2002. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/jp014261m>>. ISSN 1520-6106, ISSN 1520-5207

DOI: 10.1021/jp014261m

Código WOS: WOS:000177354000028

Código Scopus: 0037104815

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.611

Posición de publicación: 14

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.201

Posición de publicación: 6

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.201

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 95

Categoría: Materials Chemistry

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 225

Categoría: Medicine (miscellaneous)

Revista dentro del 25%: Si

**Posición de publicación:** 53**Fuente de impacto:** SCOPUS (SJR)**Índice de impacto:** 2.201**Posición de publicación:** 10**Fuente de impacto:** SCOPUS (SJR)**Índice de impacto:** 2.201**Posición de publicación:** 3**Fuente de citas:** SCOPUS**Fuente de citas:** WOS**Num. revistas en cat.:** 2.829**Categoría:** Physical and Theoretical Chemistry**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 133**Categoría:** Surfaces, Coatings and Films**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 98**Citas:** 21**Citas:** 22

- 53** Gomes, J. R.B.; Illas, F.; Cruz Hernández, Norge; Márquez Cruz, Antonio M.; Fernández Sanz, Javier. Interaction of Pd with alpha-Al₂O₃(0001): a case study of modeling the metal-oxide interface on complex substrates. PHYSICAL REVIEW B. 65 - 12, pp. 1254141 - 1254149. AMER PHYSICAL SOC, 2002. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.125414>>. ISSN 2469-9950, ISSN 2469-9969, ISSN 1098-0121, ISSN 1550-235X

DOI: 10.1103/PhysRevB.65.125414**Handle:** 11441/48570**Código Scopus:** 0037088233**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 4**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.327**Posición de publicación:** 5**Fuente de impacto:** SCOPUS (SJR)**Índice de impacto:** 2.678**Posición de publicación:** 12**Fuente de impacto:** SCOPUS (SJR)**Índice de impacto:** 2.678**Posición de publicación:** 10**Fuente de citas:** SCOPUS**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, CONDENSED MATTER**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 56**Categoría:** Condensed Matter Physics**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 333**Categoría:** Electronic, Optical and Magnetic Materials**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 146**Citas:** 58

- 54** Dupuis, M; Marquez, A. The Rys quadrature revisited: A novel formulation for the efficient computation of electron repulsion integrals over Gaussian functions. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 114 - 5, pp. 2067 - 2078. AMER INST PHYSICS, 2001. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1063/1.1336541>>. ISSN 0021-9606, ISSN 1089-7690

DOI: 10.1063/1.1336541**Handle:** 11441/48573**Código WOS:** WOS:000166676100018**Código Scopus:** 0034824060**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 2**Nº total de autores:** 2**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.147**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si



Posición de publicación: 5

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.549

Posición de publicación: 40

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.549

Posición de publicación: 5

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.549

Posición de publicación: 12

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Num. revistas en cat.: 30

Categoría: Medicine (miscellaneous)

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 2.823

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 130

Categoría: Physics and Astronomy (miscellaneous)

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 178

Citas: 36

Citas: 37

- 55** Fressigne, C; Maddaluno, J; Marquez, A; Giessner-Prettre, C. A DFT theoretical analysis of aldehyde condensation pathways onto methyllithium, lithium dimethylamide, and their aggregates. JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY. 65 - 26, pp. 8899 - 8907. AMER CHEMICAL SOC, 2000. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/jo000648u>>. ISSN 0022-3263, ISSN 1520-6904

DOI: 10.1021/jo000648u

Código WOS: WOS:000166089600009

Código Scopus: 0034731584

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.689

Posición de publicación: 5

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 2.165

Posición de publicación: 6

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, ORGANIC

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 48

Categoría: Organic Chemistry

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 136

Citas: 46

Citas: 45

- 56** Benitez, JJ; Oviedo, J; Marquez, A; Fernandez-Sanz, J; Odriozola, JA. Ab initio and experimental studies on the structure of amorphous aluminophosphate oxynitrides (AIPON). Materials Science Forum. 325-3, pp. 313 - 318. TRANS TECH PUBLICATIONS LTD, 2000. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MSF.325-326.313>>. ISSN 0255-5476, ISSN 1662-9752

DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.325-326.313

Código WOS: WOS:000088696400048

Código Scopus: 0343526855

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 0.597

Posición de publicación: 78

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 168



Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 0.482
Posición de publicación: 172

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 0.482
Posición de publicación: 114

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 0.482
Posición de publicación: 130

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 0.482
Posición de publicación: 98

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Categoría: Condensed Matter Physics
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 316

Categoría: Materials Science (miscellaneous)
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 351

Categoría: Mechanical Engineering
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 446

Categoría: Mechanics of Materials
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 239

Citas: 0

Citas: 0

- 57** Fernández Sanz, Javier; Hernández Cruz, Norge; Marquez, Antonio. A first principles study of Pd deposition on the TiO₂(110) surface. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS. 104 - 3-4, pp. 317 - 322. SPRINGER, 2000. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1007/s002140000137>>. ISSN 1432-881X, ISSN 1432-2234

DOI: 10.1007/s002140000137

Código WOS: WOS:000088616100027

Código Scopus: 0040808952

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.263

Posición de publicación: 22

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 1.745

Posición de publicación: 16

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 91

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 128

Citas: 13

Citas: 14

- 58** Marquez, A; Sanz, JF; Odriozola, JA. Theoretical investigations of NMR chemical shieldings on the AIPON catalyst system. JOURNAL OF NON-CRYSTALLINE SOLIDS. 263 - 1-4, pp. 189 - 194. ELSEVIER SCIENCE BV, 2000. Disponible en Internet en: <[https://doi.org/10.1016/S0022-3093\(99\)00634-1](https://doi.org/10.1016/S0022-3093(99)00634-1)>. ISSN 0022-3093, ISSN 1873-4812

DOI: 10.1016/S0022-3093(99)00634-1

Código WOS: WOS:000085654500019

Código Scopus: 0343517519

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Nº total de autores: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.269

Posición de publicación: 2

Tipo de soporte: Revista

Autor de correspondencia: Si

Categoría: Science Edition - MATERIALS SCIENCE, CERAMICS

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 25



Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 0.963
Posición de publicación: 11

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 0.963
Posición de publicación: 77

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 0.963
Posición de publicación: 32

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 0.963
Posición de publicación: 40

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Categoría: Ceramics and Composites
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 78

Categoría: Condensed Matter Physics
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 316

Categoría: Electronic, Optical and Magnetic Materials
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 144

Categoría: Materials Chemistry
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 209

Citas: 8

Citas: 8

59 Sanz, JF; Calzado, CJ; Marquez, A. DFT versus CI determination of the electron-transfer matrix element in some case examples. *International Journal of Quantum Chemistry*. 76 - 3, pp. 458 - 463. John Wiley & Sons, Inc., 2000. Disponible en Internet en: <[https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-461X\(2000\)76:3<458::AID-QUA14>3.0.CO;2-G](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-461X(2000)76:3<458::AID-QUA14>3.0.CO;2-G)>. ISSN 0020-7608, ISSN 1097-461X

DOI: 10.1002/(SICI)1097-461X(2000)76:3<458::AID-QUA14>3.0.CO;2-G

Código WOS: WOS:000084383900014

Código Scopus: 0000287347

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.317

Posición de publicación: 46

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 0.875

Posición de publicación: 29

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 0.875

Posición de publicación: 86

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 0.875

Posición de publicación: 44

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 91

Categoría: Atomic and Molecular Physics, and Optics

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 116

Categoría: Condensed Matter Physics

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 316

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 128

Citas: 13

Citas: 12

60 Marquez, A; Sanz, JF; Benitez, JJ; Centeno, MA; Odriozola, JA. The short-range structure of aluminophosphate oxynitride catalysts. An ab initio and experimental study. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B*. 103 - 49, pp. 10850 - 10857. AMER CHEMICAL SOC, 1999. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/jp992413w>>. ISSN 1520-6106, ISSN 1520-5207



DOI: 10.1021/jp992413w
Código WOS: WOS:000084318600015
Código Scopus: 0347939345
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 1
Nº total de autores: 5
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.658
Posición de publicación: 16

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.658
Posición de publicación: 75

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.658
Posición de publicación: 12

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.658
Posición de publicación: 5

Fuente de citas: SCOPUS
Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Autor de correspondencia: Si
Categoría: Materials Chemistry
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 206

Categoría: Medicine (miscellaneous)
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 2.845

Categoría: Physical and Theoretical Chemistry
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 126

Categoría: Surfaces, Coatings and Films
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 94

Citas: 2

Citas: 2

61 Sanz, JF; Oviedo, J; Marquez, A; Odriozola, JA; Montes, M. Adsorption of acetone onto MgO: Experimental and theoretical evidence for the presence of a surface enolate. ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION. 38 - 4, pp. 506 - 509. WILEY-VCH VERLAG GMBH, 1999. Disponible en Internet en: <[https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1521-3773\(19990215\)38:4<506::AID-ANIE506>3.0.CO;2-F](https://doi.org/10.1002/(SICI)1521-3773(19990215)38:4<506::AID-ANIE506>3.0.CO;2-F)>. ISSN 1433-7851, ISSN 1521-3773

DOI: 10.1002/(SICI)1521-3773(19990215)38:4<506::AID-ANIE506>3.0.CO;2-F

Código WOS: WOS:000078704200012

Código Scopus: 0033558160

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 7.996

Posición de publicación: 5

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 3.529

Posición de publicación: 4

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)

Índice de impacto: 3.529

Posición de publicación: 7

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 121

Categoría: Catalysis

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 30

Categoría: Chemistry (miscellaneous)

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 318

Citas: 20

Citas: 19



- 62** Marquez, AM; Lopez, N; Garcia-Hernandez, M; Illas, F. Similarities and differences in the Hartree-Fock and density-functional description of the chemisorption bond. SURFACE SCIENCE. 442 - 3, pp. 463 - 476. ELSEVIER SCIENCE BV, 1999. Disponible en Internet en: <[https://doi.org/10.1016/S0039-6028\(99\)00961-9](https://doi.org/10.1016/S0039-6028(99)00961-9)>. ISSN 0039-6028, ISSN 1879-2758
DOI: 10.1016/S0039-6028(99)00961-9
Código WOS: WOS:000083982600016
Código Scopus: 0042422861
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 1
Nº total de autores: 4
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.385
Posición de publicación: 22
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.752
Posición de publicación: 24
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.752
Posición de publicación: 14
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.752
Posición de publicación: 4
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.752
Posición de publicación: 3
Fuente de citas: SCOPUS
Fuente de citas: WOS
- Tipo de soporte:** Revista
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 90
Categoría: Condensed Matter Physics
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 311
Categoría: Materials Chemistry
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 206
Categoría: Surfaces and Interfaces
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 46
Categoría: Surfaces, Coatings and Films
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 94
Citas: 36
Citas: 34

- 63** Bredow, T; Marquez, AM; Pacchioni, G. Analysis of electronic contributions to the vibrational frequency of CO/Cu₂O(111). SURFACE SCIENCE. 430 - 1-3, pp. 137 - 145. ELSEVIER SCIENCE BV, 1999. Disponible en Internet en: <[https://doi.org/10.1016/S0039-6028\(99\)00427-6](https://doi.org/10.1016/S0039-6028(99)00427-6)>. ISSN 0039-6028, ISSN 1879-2758
DOI: 10.1016/S0039-6028(99)00427-6
Código WOS: WOS:000081492000021
Código Scopus: 0345580779
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 2
Nº total de autores: 3
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.385
Posición de publicación: 22
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.752
Posición de publicación: 24
Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.752
Posición de publicación: 14
- Tipo de soporte:** Revista
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 90
Categoría: Condensed Matter Physics
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 311
Categoría: Materials Chemistry
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 206



Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.752
Posición de publicación: 4

Categoría: Surfaces and Interfaces
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 46

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 1.752
Posición de publicación: 3

Categoría: Surfaces, Coatings and Films
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 94

Fuente de citas: SCOPUS

Citas: 29

Fuente de citas: WOS

Citas: 30

- 64** Sanz, JF; Rabaa, H; Poveda, FM; Marquez, AM; Calzado, CJ. Theoretical models for gamma-Al₂O₃ (110) surface hydroxylation: An ab initio embedded cluster study. International Journal of Quantum Chemistry. 70 - 2, pp. 359 - 365. John Wiley & Sons, Inc., 1998. Disponible en Internet en: <[https://doi.org/10.1002/\(sici\)1097-461x\(1998\)70:2<359::aid-qua12>3.0.co;2-7](https://doi.org/10.1002/(sici)1097-461x(1998)70:2<359::aid-qua12>3.0.co;2-7)>. ISSN 0020-7608, ISSN 1097-461X

DOI: 10.1002/(sici)1097-461x(1998)70:2<359::aid-qua12>3.0.co;2-7

Código WOS: WOS:000076058400012

Código Scopus: 0001822716

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 4

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 1.270

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 48

Num. revistas en cat.: 92

Fuente de citas: SCOPUS

Citas: 20

Fuente de citas: WOS

Citas: 18

- 65** Pacchioni, G; Ierano, G; Marquez, AM. Optical absorption and nonradiative decay mechanism of E' center in silica. PHYSICAL REVIEW LETTERS. 81 - 2, pp. 377 - 380. AMER PHYSICAL SOC, 1998. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.81.377>>. ISSN 0031-9007, ISSN 1079-7114

DOI: 10.1103/PhysRevLett.81.377

Handle: 11441/48571

Código WOS: WOS:000074750400034

Código Scopus: 0000670477

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: Science Edition - PHYSICS

Índice de impacto: 6.017

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 5

Num. revistas en cat.: 65

Fuente de citas: SCOPUS

Citas: 115

Fuente de citas: WOS

Citas: 111

- 66** Marquez, AM; Sanz, JF. Structure of a mononuclear rhenium catalyst supported on MgO: An ab initio study. JOURNAL OF MOLECULAR CATALYSIS A-CHEMICAL. 119 - 1-3, pp. 195 - 200. ELSEVIER SCIENCE BV, 1997. Disponible en Internet en: <[https://doi.org/10.1016/S1381-1169\(96\)00483-9](https://doi.org/10.1016/S1381-1169(96)00483-9)>. ISSN 1381-1169, ISSN 1873-314X

DOI: 10.1016/S1381-1169(96)00483-9



Código WOS: WOS:A1997XC82600022

Código Scopus: 0342710367

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Nº total de autores: 2

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.478

Posición de publicación: 35

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Autor de correspondencia: Si

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 86

Citas: 2

Citas: 2

- 67** Illas, F; Zurita, S; Marquez, AM; Rubio, J. On the bonding mechanism of CO to Pt(111) and its effect on the vibrational frequency of chemisorbed CO. SURFACE SCIENCE. 376 - 1-3, pp. 279 - 296. ELSEVIER SCIENCE BV, 1997. Disponible en Internet en: <[https://doi.org/10.1016/S0039-6028\(96\)01595-6](https://doi.org/10.1016/S0039-6028(96)01595-6)>. ISSN 0039-6028, ISSN 1879-2758

DOI: 10.1016/S0039-6028(96)01595-6

Código WOS: WOS:A1997WV02600035

Código Scopus: 0031118864

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.180

Posición de publicación: 21

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 86

Citas: 55

Citas: 57

- 68** Marquez, AM; Oviedo, J; Sanz, JF; Dupuis, M. Parallel computation of second derivatives of RHF energy on distributed memory computers. JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY. 18 - 2, pp. 159 - 168. John Wiley & Sons, Inc., 1997. Disponible en Internet en: <[https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1096-987X\(19970130\)18:2<159::AID-JCC2>3.0.CO;2-U](https://doi.org/10.1002/(SICI)1096-987X(19970130)18:2<159::AID-JCC2>3.0.CO;2-U)>. ISSN 0192-8651, ISSN 1096-987X

DOI: 10.1002/(SICI)1096-987X(19970130)18:2<159::AID-JCC2>3.0.CO;2-U

Código WOS: WOS:A1997WB11200002

Código Scopus: 0007041268

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.357

Posición de publicación: 8

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Autor de correspondencia: Si

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 111

Citas: 15

Citas: 14



- 69** Marquez, AM; Oviedo, J; Sanz, JF; Benitez, JJ; Odriozola, JA. Geometric and electronic structure of amorphous aluminophosphates. Ab initio and experimental studies. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 101 - 46, pp. 9510 - 9516. AMER CHEMICAL SOC, 1997. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/jp972147r>>. ISSN 1520-6106, ISSN 1520-5207
DOI: 10.1021/jp972147r
Código WOS: WOS:A1997YG46300014
Código Scopus: 0031270077
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 1 **Autor de correspondencia:** Si
Nº total de autores: 5 **Citas:** 17
Fuente de citas: SCOPUS **Citas:** 17
Fuente de citas: WOS **Citas:** 17
- 70** Oviedo, J; Calzado, CJ; SanMiguel, MA; Marquez, A; Sanz, JF. An ab initio study of the CH₂O adsorption on the MgO (100) surface. Effects of replacing the active Mg²⁺ ion by different metallic cations. JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM. 390 - 1-3, pp. 177 - 181. ELSEVIER SCIENCE BV, 1997. Disponible en Internet en: <[https://doi.org/10.1016/S0166-1280\(96\)04772-0](https://doi.org/10.1016/S0166-1280(96)04772-0)>. ISSN 0166-1280
DOI: 10.1016/S0166-1280(96)04772-0
Código WOS: WOS:A1997WT89000021
Código Scopus: 0042764671
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 4 **Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Nº total de autores: 5 **Revista dentro del 25%:** No
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Num. revistas en cat.:** 86
Índice de impacto: 0.913 **Citas:** 2
Posición de publicación: 56 **Citas:** 0
Fuente de citas: SCOPUS **Citas:** 0
Fuente de citas: WOS **Citas:** 0
- 71** Pacchioni, G; Ferrari, AM; Marquez, AM; Illas, F. Importance of Madelung potential in quantum chemical modeling of ionic surfaces. JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY. 18 - 5, pp. 617 - 628. John Wiley & Sons, Inc., 1997. Disponible en Internet en: <[https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1096-987X\(19970415\)18:5<617::AID-JCC3>3.0.CO;2-Q](https://doi.org/10.1002/(SICI)1096-987X(19970415)18:5<617::AID-JCC3>3.0.CO;2-Q)>. ISSN 0192-8651, ISSN 1096-987X
DOI: 10.1002/(SICI)1096-987X(19970415)18:5<617::AID-JCC3>3.0.CO;2-Q
Código WOS: WOS:A1997WQ57500003
Código Scopus: 0004778899
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 3 **Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY
Nº total de autores: 4 **Revista dentro del 25%:** Si
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Num. revistas en cat.:** 111
Índice de impacto: 3.357 **Citas:** 82
Posición de publicación: 8 **Citas:** 79
Fuente de citas: SCOPUS **Citas:** 79
Fuente de citas: WOS **Citas:** 79



- 72** SanMiguel, MA; Marquez, A; Sanz, JF. Molecular and electronic structure of zinc carbyne, HZnCH, and zinc stannyne, HZnSnH, from ab initio calculations. Journal of physical chemistry. 100 - 5, pp. 1600 - 1604. American Chemical Society, 1996. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/jp952199l>>. ISSN 0022-3654
DOI: 10.1021/jp952199l
Código WOS: WOS:A1996TT53300023
Código Scopus: 33748609381
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 2
Nº total de autores: 3
Fuente de citas: SCOPUS **Citas:** 3
Fuente de citas: WOS **Citas:** 1
- 73** SanMiguel, MA; Marquez, A; Sanz, JF. A theoretical study of ZnCH₂ and ZnSnH₂ electronic structure and the ZnCH₂-HZnCH photolytic rearrangement. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 118 - 2, pp. 429 - 436. AMER CHEMICAL SOC, 1996. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/ja951865t>>. ISSN 0002-7863, ISSN 1520-5126
DOI: 10.1021/ja951865t
Código WOS: WOS:A1996TQ26900017
Código Scopus: 3643087546
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 2
Nº total de autores: 3
Fuente de citas: SCOPUS **Citas:** 6
Fuente de citas: WOS **Citas:** 3
- 74** ESPINOSAGARCIA, J; CORCHADO, JC; FERNANDEZ, J; MARQUEZ, A. Theoretical values of the enthalpies of formation of the NH_x (x=1, 2, 3) compounds - importance of the core-correlation effects. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 233 - 3, pp. 220 - 226. ELSEVIER SCIENCE BV, 1995. Disponible en Internet en: <[https://doi.org/10.1016/0009-2614\(94\)01412-O](https://doi.org/10.1016/0009-2614(94)01412-O)>. ISSN 0009-2614, ISSN 1873-4448
DOI: 10.1016/0009-2614(94)01412-O
Código WOS: WOS:A1995QG63000004
Código Scopus: 0011544952
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 4
Nº total de autores: 4
Fuente de citas: SCOPUS **Citas:** 24
Fuente de citas: WOS **Citas:** 22
- 75** MARQUEZ, AM; DUPUIS, M. Parallel computation of the mp2 energy on distributed-memory computers. JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY. 16 - 4, pp. 395 - 404. John Wiley & Sons, Inc., 1995. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1002/jcc.540160402>>. ISSN 0192-8651, ISSN 1096-987X
DOI: 10.1002/jcc.540160402
Código WOS: WOS:A1995QM02200001
Código Scopus: 84986525880
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 1
Nº total de autores: 2 **Autor de correspondencia:** Si
Fuente de citas: SCOPUS **Citas:** 28
Fuente de citas: WOS **Citas:** 28



- 76** ILLAS, F; ZURITA, S; RUBIO, J; MARQUEZ, AM. Origin of the vibrational shift of co chemisorbed on pt(111). PHYSICAL REVIEW B. 52 - 16, pp. 12372 - 12379. AMER PHYSICAL SOC, 1995. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.52.12372>>. ISSN 2469-9950, ISSN 2469-9969, ISSN 1098-0121, ISSN 1550-235X
DOI: 10.1103/PhysRevB.52.12372
Handle: 11441/48569
Código WOS: WOS:A1995TB96600113
Código Scopus: 0001124074
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 4
Nº total de autores: 4
Fuente de citas: SCOPUS **Citas:** 54
Fuente de citas: WOS **Citas:** 56
- 77** CAPITAN, MJ; CENTENO, MA; MALET, P; CARRIZOSA, I; ODRIOZOLA, JA; MARQUEZ, A; SANZ, JF. DRIFTS, XPS, XAS, and ab initio study of lanthanide oxides supported on gamma-Al₂O₃. Journal of physical chemistry. 99 - 13, pp. 4655 - 4660. American Chemical Society, 1995. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/j100013a041>>. ISSN 0022-3654
DOI: 10.1021/j100013a041
Código WOS: WOS:A1995QQ60100041
Código Scopus: 0029274398
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 6
Nº total de autores: 7
Fuente de citas: SCOPUS **Citas:** 45
Fuente de citas: WOS **Citas:** 44
- 78** MARQUEZ, A; ANGUIANO, J; GONZALEZ, G; SANZ, JF. A theoretical approach to the molecular-structure of vinylstannane and some structural isomers. JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY. 486 - 1-2, pp. 45 - 50. Elsevier Science, 1995. Disponible en Internet en: <[https://doi.org/10.1016/0022-328X\(94\)05065-J](https://doi.org/10.1016/0022-328X(94)05065-J)>. ISSN 0022-328X, ISSN 1872-8561
DOI: 10.1016/0022-328X(94)05065-J
Código WOS: WOS:A1995QC35100005
Código Scopus: 58149363154
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 1
Nº total de autores: 4
Fuente de citas: SCOPUS **Citas:** 2
Fuente de citas: WOS **Citas:** 2
- 79** CAPITAN, MJ; ODRIOZOLA, JA; MARQUEZ, A; SANZ, JF. Ab-initio scf-mo study of the chemisorption of methane on al and la oxide surfaces. JOURNAL OF CATALYSIS. 156 - 2, pp. 273 - 278. ACADEMIC PRESS INC ELSEVIER SCIENCE, 1995. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1006/jcat.1995.1254>>. ISSN 0021-9517, ISSN 1090-2694
DOI: 10.1006/jcat.1995.1254
Código WOS: WOS:A1995RZ09300008
Código Scopus: 0001471469
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista

**Posición de firma:** 3**Nº total de autores:** 4**Fuente de citas:** SCOPUS**Citas:** 14**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 14

- 80** MEJIAS, JA; MARQUEZ, AM; SANZ, JF; FERNANDEZGARCIA, M; RICART, JM; SOUSA, C; ILLAS, F. On modeling the interaction of CO on the mgo(100) surface. SURFACE SCIENCE. 327 - 1-2, pp. 59 - 73. ELSEVIER SCIENCE BV, 1995. Disponible en Internet en: <[https://doi.org/10.1016/0039-6028\(94\)00831-0](https://doi.org/10.1016/0039-6028(94)00831-0)>. ISSN 0039-6028, ISSN 1879-2758

DOI: 10.1016/0039-6028(94)00831-0**Código WOS:** WOS:A1995QP31600011**Código Scopus:** 0029292108**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 2**Nº total de autores:** 7**Fuente de citas:** SCOPUS**Citas:** 88**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 87

- 81** MARQUEZ, A; CAPITAN, MJ; ODRIOZOLA, JA; SANZ, JF. Spectroscopic properties and potential-energy curves of some low-lying electronic states of alo, alo+, lao, and lao+ - an ab-initio casscf study. International Journal of Quantum Chemistry. 52 - 6, pp. 1329 - 1338. John Wiley & Sons, Inc., 1994. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1002/qua.560520608>>. ISSN 0020-7608, ISSN 1097-461X

DOI: 10.1002/qua.560520608**Código WOS:** WOS:A1994PU07800007**Código Scopus:** 84987143441**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 1**Nº total de autores:** 4**Fuente de citas:** SCOPUS**Autor de correspondencia:** Si**Citas:** 34**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 31

- 82** MARQUEZ, A; SANZ, JF; GELIZE, M; DARGELOS, A. The vacuum ultraviolet-spectrum of [MN₂(CO)₁₀]. JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY. 434 - 2, pp. 235 - 240. Elsevier Science, 1992. Disponible en Internet en: <[https://doi.org/10.1016/0022-328X\(92\)83308-5](https://doi.org/10.1016/0022-328X(92)83308-5)>. ISSN 0022-328X, ISSN 1872-8561

DOI: 10.1016/0022-328X(92)83308-5**Código WOS:** WOS:A1992JK28600009**Código Scopus:** 0042104078**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 1**Nº total de autores:** 4**Fuente de citas:** SCOPUS**Citas:** 7**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 7

- 83** Fdez. Sanz, Javier; Márquez-Cruz, Antonio M.; Anguiano-Cristobal, Julio. A theoretical approach to the molecular structure and vibrational spectrum of the alc₂h₄ complex from casscf and uhf second-order perturbation calculations. Journal of physical chemistry. 96 - 17, pp. 6974 - 6978. American Chemical Society, 1992. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/j100196a023>>. ISSN 0022-3654

DOI: 10.1021/j100196a023



Código WOS: WOS:A1992JK80700023

Código Scopus: 0037627091

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 3

Fuente de citas: SCOPUS

Citas: 6

Fuente de citas: WOS

Citas: 6

- 84** Marquez, Antonio; Daniel, Chantai; Sanz, Javier Fernandez. The vacuum-ultraviolet spectrum of Fe(CO)₅: An experimental analysis supported by a CASSCF CCI study of the Rydberg states. Journal of physical chemistry. 96 - 1, pp. 121 - 123. American Chemical Society, 1992. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/j100180a027>>. ISSN 0022-3654

DOI: 10.1021/j100180a027

Código WOS: WOS:A1992GZ69700027

Código Scopus: 33751391221

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 1

Nº total de autores: 3

Fuente de citas: SCOPUS

Citas: 21

Fuente de citas: WOS

Citas: 21

- 85** GONZALEZ, AG; MARQUEZ, A; SANZ, JF. An iterative algorithm for consistent and unbiased estimation of linear-regression parameters when there are errors in both the x-variables and y-variables. Computers & Chemistry. 16 - 1, pp. 25 - 27. Elsevier Ltd., 1992. Disponible en Internet en: <[https://doi.org/10.1016/0097-8485\(92\)85004-l](https://doi.org/10.1016/0097-8485(92)85004-l)>. ISSN 0097-8485

DOI: 10.1016/0097-8485(92)85004-l

Código WOS: WOS:A1992HH76700004

Código Scopus: 9444269888

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 3

Fuente de citas: SCOPUS

Citas: 9

Fuente de citas: WOS

Citas: 7

- 86** Márquez-Cruz, Antonio M.; Fdez. Sanz, Javier. Electronic structure of the transition-metal-carbene-like complexes (Co)₅Mo-M'H₂ (M'=C, Si, Ge, and Sn). A theoretical study based on ab initio casscf calculations. JOURNAL OF PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLIDS. 114 - 8, pp. 2903 - 2909. PERGAMON-ELSEVIER SCIENCE LTD, 1992. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/ja00034a022>>. ISSN 0022-3697, ISSN 1879-2553

DOI: 10.1021/ja00034a022

Código WOS: WOS:A1992HM89700022

Código Scopus: 0038568240

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 1

Nº total de autores: 2

Fuente de citas: SCOPUS

Citas: 48

Fuente de citas: WOS

Citas: 53



- 87** Márquez, Antonio; Anguiano, Julio; Sanz, Javier Fernández. An ab initio CASSCF study of the HO + NOCl reaction. *Journal of physical chemistry*. 96 - 5, pp. 2115 - 2118. American Chemical Society, 1992. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/j100184a019>>. ISSN 0022-3654
DOI: 10.1021/j100184a019
Código WOS: WOS:A1992HG75300019
Código Scopus: 33751390993
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 1
Nº total de autores: 3
Fuente de citas: SCOPUS **Citas:** 0
Fuente de citas: WOS **Citas:** 0
- 88** Márquez-Cruz, Antonio M.; Fernández-Sanz, Javier. Ab initio CASSCF study of the electronic structure of the transition-meta alkylidene-like complexes Mo-M H₂ (M = C, Si, Ge, and Sn). *JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY*. 114 - 25, pp. 10019 - 10024. AMER CHEMICAL SOC, 1992. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/ja00051a039>>. ISSN 0002-7863, ISSN 1520-5126
DOI: 10.1021/ja00051a039
Código WOS: WOS:A1992KA79800039
Código Scopus: 0001581343
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 1
Nº total de autores: 2
Fuente de citas: SCOPUS **Citas:** 19
Fuente de citas: WOS **Citas:** 19
- 89** MARQUEZ, A; SANZ, JF; GELIZE, M; DARGELOS, A. Abinitio calculations of molecular and electronic-structure of disilane .1. Molecular-force field and vibrational-spectrum. *CHEMICAL PHYSICS*. 149 - 3, pp. 311 - 318. ELSEVIER SCIENCE BV, 1991. Disponible en Internet en: <[https://doi.org/10.1016/0301-0104\(91\)90030-W](https://doi.org/10.1016/0301-0104(91)90030-W)>. ISSN 0301-0104, ISSN 1873-4421
DOI: 10.1016/0301-0104(91)90030-W
Código WOS: WOS:A1991ER20100004
Código Scopus: 0012489515
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 1
Nº total de autores: 4
Fuente de citas: SCOPUS **Citas:** 12
Fuente de citas: WOS **Citas:** 13
- 90** GELIZE, M; DARGELOS, A; MARQUEZ, A; SANZ, JF. Abinitio calculations of molecular and electronic-structure of disilane .2. Photoelectron and vacuum uv electronic-spectra. *CHEMICAL PHYSICS*. 149 - 3, pp. 333 - 339. ELSEVIER SCIENCE BV, 1991. Disponible en Internet en: <[https://doi.org/10.1016/0301-0104\(91\)90033-P](https://doi.org/10.1016/0301-0104(91)90033-P)>. ISSN 0301-0104, ISSN 1873-4421
DOI: 10.1016/0301-0104(91)90033-P
Código WOS: WOS:A1991ER20100007
Código Scopus: 0037596428
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 3
Nº total de autores: 4
Fuente de citas: SCOPUS **Citas:** 3

**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 2

- 91** SANZ, JF; MARQUEZ, A. Molecular-structure and vibrational analysis of distannane from abinitio 2nd-order perturbation calculations a theoretical approach to the tin-c-bond, tin-si-bond, tin-ge-bond, tin-sn-bond. Journal of physical chemistry. 93 - 21, pp. 7328 - 7333. American Chemical Society, 1989. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/j100358a013>>. ISSN 0022-3654

DOI: 10.1021/j100358a013**Código WOS:** WOS:A1989AX04900013**Código Scopus:** 33745752946**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 2**Nº total de autores:** 2**Fuente de citas:** SCOPUS**Citas:** 7**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 5

- 92** Fdez. Sanz, Javier; Márquez-Cruz, Antonio M.; Pouchan-,Claude. Vibrational spectra of stannane: harmonic force field, raman, and ir intensities from ab initio correlated wavefunctions. CHEMICAL PHYSICS. 130 - 1-3, pp. 451 - 456. ELSEVIER SCIENCE BV, 1989. Disponible en Internet en: <[https://doi.org/10.1016/0301-0104\(89\)87073-9](https://doi.org/10.1016/0301-0104(89)87073-9)>. ISSN 0301-0104, ISSN 1873-4421

DOI: 10.1016/0301-0104(89)87073-9**Código WOS:** WOS:A1989T202600043**Código Scopus:** 45349111219**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 2**Nº total de autores:** 3**Fuente de citas:** SCOPUS**Citas:** 4**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 5

- 93** Márquez-Cruz, Antonio M.; González González, Antonio Gustavo; Fdez. Sanz, Javier. Ab initio ci calculations on the molecular structure of Sn₂H₄ isomers. CHEMICAL PHYSICS. 138 - 1, pp. 99 - 104. ELSEVIER SCIENCE BV, 1989. Disponible en Internet en: <[https://doi.org/10.1016/0301-0104\(89\)80260-5](https://doi.org/10.1016/0301-0104(89)80260-5)>. ISSN 0301-0104, ISSN 1873-4421

DOI: 10.1016/0301-0104(89)80260-5**Código WOS:** WOS:A1989AY83500010**Código Scopus:** 0002862908**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 1**Nº total de autores:** 3**Fuente de citas:** SCOPUS**Citas:** 20**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 22

- 94** Plata, José J.; Nath, Pinku; Fdez Sanz, Javier; Marquez, Antonio. In silico modeling of inorganic thermoelectric materials. Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering. 1-10, pp. 446 - 460. ELSEVIER, 2023. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1016/b978-0-12-823144-9.00133-3>>.

DOI: 10.1016/b978-0-12-823144-9.00133-3**Código Scopus:** 85152689818**Tipo de producción:** Capítulo de libro**Tipo de soporte:** Libro**Posición de firma:** 4**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de capítulo de libro

**Nº total de autores:** 4**Fuente de citas:** SCOPUS**Citas:** 1

- 95** Amaya Suárez, Javier; Remesal, Elena R.; Plata, Jose J.; Márquez, Antonio M.; Fernández Sanz, Javier. Computational Modeling of Carbon Dioxide Catalytic Conversion. Engineering Solutions for CO₂ Conversion. pp. 85 - 103. WILEY, 2021. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1002/9783527346523.ch4>>.

DOI: 10.1002/9783527346523.ch4**Código Scopus:** 85152833711**Tipo de producción:** Capítulo de libro**Posición de firma:** 4**Tipo de soporte:** Revista**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de capítulo de libro**Nº total de autores:** 5**Fuente de citas:** SCOPUS**Citas:** 0

- 96** Dupuis, Michel; Chin, Steve; Marquez, Antonio. Modern Tools for Including Electron Correlation in Electronic Structure Studies: Hondo and Chem-Station. Relativistic and Electron Correlation Effects in Molecules and Solids. pp. 315 - 338. Springer US, 2013. Disponible en Internet en: <https://doi.org/10.1007/978-1-4899-1340-1_11>. ISBN 9781489913425

DOI: 10.1007/978-1-4899-1340-1_11**Tipo de producción:** Capítulo de libro**Posición de firma:** 3**Tipo de soporte:** Libro**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de capítulo de libro**Nº total de autores:** 3

- 97** DUPUIS, M.; MARQUEZ, A.. Weak overlap and spin recoupling: applications of the cas scf method. Recent Advances in Multireference Methods. pp. 197 - 214. World Scientific, 2012. Disponible en Internet en: <https://doi.org/10.1142/9789812812186_0007>.

DOI: 10.1142/9789812812186_0007**Tipo de producción:** Capítulo de libro**Posición de firma:** 2**Tipo de soporte:** Libro**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de capítulo de libro**Nº total de autores:** 2

- 98** Antonio Marcial Márquez Cruz. Estudio teórico y experimental de la estructura electrónica de algunos carbonilos de metales de transición y análisis del enlace que establecen con metales representativos del grupo 14. Universidad de Sevilla, 1992. ISBN 84-7405-894-5

Código de Dialnet: LIB 764945**Tipo de producción:** Libro o monografía científica**Posición de firma:** 1**Tipo de soporte:** Libro**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de libro completo**Nº total de autores:** 1**Fuente de citas:** Dialnet**Citas:** 0

- 99** Kyriakou, Georgios; Márquez, Antonio M.; Holgado, Juan Pedro; Taylor, Martin J.; Wheatley, Andrew E.H.; Mehta, Joshua P.; Fraser, Adam E.; Fernández Sanz, Javier; Beaumont, Simon K.; Lambert, Richard M.. Correction: Comprehensive Experimental and Theoretical Study of the CO+NO Reaction Catalyzed by Au/Ni Nanoparticles (ACS Catalysis (2019) 9:6 (4919-4929) DOI: 10.1021/acscatal.8b05154). ACS CATALYSIS. 9 - 10, pp. 9310 - 9310. AMER CHEMICAL SOC, 2019. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/acscatal.9b03760>>. ISSN 2155-5435

DOI: 10.1021/acscatal.9b03760**Código WOS:** WOS:000489204000054**Código Scopus:** 85072919038



Tipo de producción: Corrección
Posición de firma: 2
Nº total de autores: 10

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 12.350
Posición de publicación: 12

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 4.633
Posición de publicación: 4

Fuente de impacto: SCOPUS (SJR)
Índice de impacto: 4.633
Posición de publicación: 17

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 159

Categoría: Catalysis
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 55

Categoría: Chemistry (miscellaneous)
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 435

Citas: 1

Citas: 1

- 100** GAO, Y; FROSTJENSEN, A; PRESSPRICH, MR; COPPENS, P; MARQUEZ, A; DUPUIS, M. Valence contrast by synchrotron resonance scattering - Application to a mixed-valence manganese compound. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 114 - 23, pp. 9214 - 9215. AMER CHEMICAL SOC, 1992. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/ja00049a079>>. ISSN 0002-7863, ISSN 1520-5126

DOI: 10.1021/ja00049a079

Código WOS: WOS:A1992JW79700079

Código Scopus: 0000749927

Tipo de producción: Nota

Posición de firma: 5

Nº total de autores: 6

Fuente de citas: SCOPUS

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Citas: 25

Citas: 22

- 101** Gelizé, Michel; Dargelos, Alain; Márquez, Antonio; Fernández Sanz, Javier. Ab initio calculations of molecular and electronic structure of disilane. II. Photoelectron and vacuum UV electronic spectra. CHEMICAL PHYSICS. 150 - 3, ELSEVIER SCIENCE BV, 1991. Disponible en Internet en: <[https://doi.org/10.1016/0301-0104\(91\)87120-K](https://doi.org/10.1016/0301-0104(91)87120-K)>. ISSN 0301-0104, ISSN 1873-4421

DOI: 10.1016/0301-0104(91)87120-K

Código Scopus: 44949283973

Tipo de producción: Corrección

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 4

Fuente de citas: SCOPUS

Tipo de soporte: Revista

Citas: 0



Trabajos presentados en congresos nacionales o internacionales

Título del trabajo: Molecular orbital studies of electric field-controlled electron transfer

Tipo evento: Congreso

Dupuis, Michel; Marquez, Antonio. "Molecular orbital studies of electric field-controlled electron transfer". En: AIP Conference Proceedings. AMER INST PHYSICS; AIP; AIP Publishing, 2008. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1063/1.42670>>. ISSN 0094-243X, ISSN 1551-7616

DOI: 10.1063/1.42670

Trabajos presentados en jornadas, seminarios, talleres de trabajo y/o cursos nacionales o internacionales

Título del trabajo: Incorporation of nitrogen into AIPON and mixed MAIPON(M=Ga, In, Ti): Effects on structure and thermal stability

Marquez, A. M.. "Incorporation of nitrogen into AIPON and mixed MAIPON(M=Ga, In, Ti): Effects on structure and thermal stability". En: Materials Science Forum. 383. TRANS TECH PUBLICATIONS LTD, 2002, pp. 97 - 104. ISSN 0255-5476, ISSN 1662-9752

Código Scopus: 0036139216